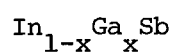


ETUDE DE L'ALLIAGE SEMICONDUCTEUR



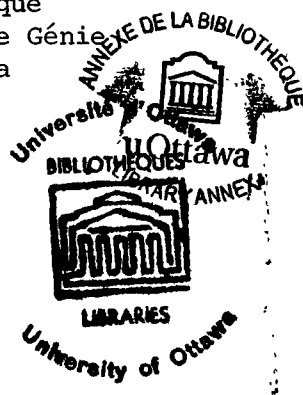
PAR MAGNETO-OPTIQUE INTERBANDE

par

Alain P. Roth

Thèse présentée à l'Ecole des Etudes Supérieures
de l'Université d'Ottawa
en vue de l'obtention du doctorat en Physique (PhD)

Département de Physique
Faculté des Sciences et de Génie
Université d'Ottawa
Ottawa, Canada
1978



UMI Number: DC53314

INFORMATION TO USERS

The quality of this reproduction is dependent upon the quality of the copy submitted. Broken or indistinct print, colored or poor quality illustrations and photographs, print bleed-through, substandard margins, and improper alignment can adversely affect reproduction.

In the unlikely event that the author did not send a complete manuscript and there are missing pages, these will be noted. Also, if unauthorized copyright material had to be removed, a note will indicate the deletion.



UMI Microform DC53314
Copyright 2011 by ProQuest LLC
All rights reserved. This microform edition is protected against
unauthorized copying under Title 17, United States Code.

ProQuest LLC
789 East Eisenhower Parkway
P.O. Box 1346
Ann Arbor, MI 48106-1346

*Les théories proposent des réponses,
l'expérience et la réflexion conduisent
à des conclusions.*

Albert Einstein

A B S T R A C T

The purpose of this work is to obtain a consistent set of band parameters for a given alloy ($\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$) in a single set of experiments and to compare these results with theoretical predictions. The analysis of interband magneto-optical transitions in a semiconductor is known to be a very efficient manner to measure band parameters. Such an experiment can be performed in different ways. The study of the spectral variation of the photovoltage obtained at a metal-semiconductor barrier which has proved to be very successful [R76] for various semiconductors is used here.

$\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ can be grown for any values of x [C69, J75] and some measurements have already been done on this alloy system [C69, A69, A74, T70]. Samples of good quality have been made available by Pr. J.C. Woolley and by Dr. A. Joullié (Université de Montpellier). These samples were polycrystalline and thus a magneto-optical model which would take into account the polycrystallinity had to be developed. The best basis for such a model is the theory of Pidgeon and Brown [P66] which considers the special case of a monocrystal in a magnetic field oriented parallel to the $(1\bar{1}0)$ plane. This theory is generalized to an arbitrary field orientation and it is shown that this model can be used to study polycrystalline materials. A brief review of the photovoltaic effect and its application to interband spectroscopy is followed by a description of the experimental method. The band parameters deduced from the analysis of the experimental data with the model developed here are presented. Finally the composition dependence of these parameters is compared with other experimental results and with theoretical predictions. The overall agreement of the results obtained in this work with other published values shows that the coupled band scheme is able to predict the band parameter variation in $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$.

R E M E R C I E M E N T S

Je tiens à remercier le Professeur Emery Fortin qui m'a accueilli dans son groupe de recherche et m'a suggéré ce travail. Les nombreuses discussions que nous avons eues ont fortement contribué à l'avancement de cette thèse.

Le Professeur John C. Woolley a bien voulu nous donner de nombreux échantillons, et ses commentaires sur les alliages semiconducteurs ont été des plus utiles. Je lui en suis reconnaissant.

J'ai beaucoup apprécié la collaboration du Dr. André Joullié de l'Université de Montpellier auprès de qui j'ai pu obtenir d'excellents spécimens.

Paul Rochon a bien voulu me faire profiter de son expérience dans de nombreux domaines dont la magnéto-optique.

Parmi les membres du Département de Physique avec qui j'ai eu de fructueux échanges concernant ce travail je tiens à remercier plus particulièrement les Dr. R.C. Smith, K.S. Song et H. Glyde, mes confrères G. Goodchild et A. Guilbaud ainsi que F.G.D. Prat qui s'est fait l'avocat du diable.

La collaboration du personnel du Département de Physique a été fort appréciée ainsi que celle des étudiants qui m'ont aidé durant les mois d'été, en particulier M. Lacroix.

La majorité des figures est l'oeuvre de M. Brousseau et cette thèse a été dactylographiée par Carmen Lemieux que je remercie.

Le Conseil des Arts du Canada a largement participé à mon soutien financier par l'octroi d'une bourse d'Echanges Culturels.

S O M M A I R E

ABSTRACT	i
REMERCIEMENTS	ii
SOMMAIRE	iv
INTRODUCTION	1
CHAPITRE I Semiconducteur dans un champ magnétique	6
I. Modèle de Kane	10
II. Schéma de bandes au point Γ pour InSb et GaSb	12
III. Action du champ magnétique sur un monocristal d'orientation arbitraire.	14
A- Présentation du modèle de Kane pour un monocristal en présence d'un champ magnétique.	16
B- Développement du modèle	18
1. Développement des termes $\Pi_{jj'}$, et $D_{jj'}^{\alpha\beta}$	20
2. Développement de $[(\sigma \times \Delta V) \cdot p]_{jj'}$, et $(\sigma_3)_{jj'}$	26
3. Eléments de la matrice d'interaction H'^{88}	27
IV. Anisotropie des niveaux de Landau et des masses efficaces	32
V. Transitions interbandes dans un monocristal soumis à un champ magnétique.	41
A- Règles de sélection	41
B- Anisotropie des transitions interbandes	45
VI. Application aux polycristaux	49
A- Elargissement des structures dans les expériences de magnéto-optique interbande sur des échantillons polycristallins.	49
B- Analyse des transitions interbandes dans un polycristal	51
CHAPITRE II Utilisation de l'effet photovoltaïque en spectroscopie interbande	57
I. Contact métal-semiconducteur	58
A- Etats de surface	58
B- Contact rectifiant, barrière de Schottky	59
II. Variation spectrale du photovoltage	62

III. Détermination des énergies de transition dans le semiconducteur	63
A- Champ magnétique nul	64
B- Champ magnétique non nul	68
C- Conclusion	70
CHAPITRE III. Matériaux, Instrumentation et Expériences	72
I. Préparation des échantillons	73
A- Caractérisation des spécimens	73
B- Préparation des cellules photovoltaïques	75
II. Système optique	
III. Traitement et enregistrement des spectres	79
IV. Cryostats et bobines supraconductrices	81
A- Description des cryostats	82
B- Alimentation des bobines supraconductrices	84
V. Procédure expérimentale	85
A- Refroidissement	85
B- Mesures	86
CHAPITRE IV Résultats expérimentaux et analyse	88
I. Variation spectrale expérimentale du photovoltage	89
A- Champ magnétique nul	89
B- Champ magnétique non nul	92
1. InSb polycristallin	92
2. $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$	96
II. Diagrammes des énergies de transition en fonction du champ magnétique	99
III. Analyse des énergies de transition	118
IV. Test de la méthode d'analyse et paramètres de bandes de $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$	121
CHAPITRE V Variation des paramètres de bandes dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$	125
I. Etudes théoriques de $E_0(x)$ et $\Delta_0(x)$	126
A- Variation de $E_0(x)$	127
B- Variation de $\Delta_0(x)$	130

II.	Variation expérimentale de $E_0(x)$ et $\Delta_0(x)$ dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$	131
III.	Masse efficace de la bande de conduction (m_c)	137
A-	Méthode $\vec{k} \cdot \vec{p}$	137
B-	Mesures expérimentales de m_c et corrections du modèle $\vec{k} \cdot \vec{p}$	139
C-	Variation de F et E_p dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$	141
D-	Variation de m_c calculée dans le modèle de bandes couplées	146
IV.	Facteur de Landé de la bande de conduction (g_c)	148
V.	Paramètres de Luttinger et masses efficaces de la bande de valence	151
	CONCLUSION	159
	ANNEXES	161
	ANNEXE A Notations, Théorie des Groupes et Paramètres de bandes	162
I.	Représentations irréductibles du groupe T_d (point Γ)	162
II.	Paramètres $\vec{k} \cdot \vec{p}$	163
	ANNEXE B Unités de champ magnétique	169
	ANNEXE C Anisotropie des niveaux de Landau dans GaSb	170
	ANNEXE D Préparation de $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$	175
I.	Quelques remarques sur la formation des alliages	175
II.	Méthodes de préparation de $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$	176
	REFERENCES	178
	NOTICE BIOGRAPHIQUE	185

I N T R O D U C T I O N

L'étude des matériaux semiconducteurs, tant sur le plan théorique que sur le plan pratique est incontestablement une branche majeure de la physique de l'état solide. Depuis de nombreuses années les propriétés physiques des matériaux élémentaires, Si, Ge par exemple, ont été étudiées et cela a permis une meilleure compréhension de la nature même de ces matériaux. Par la suite, de nombreux composés (GaAs, InSb, et tous les composés binaires III-V ou II-VI par exemple) ont été étudiés en s'appuyant sur les connaissances acquises à partir des éléments simples. On a pu ainsi déduire les schémas de bandes des composés III-V des résultats obtenus avec Ge et Si [C63]. Tous ces composés ont été essentiellement étudiés sous forme cristalline mais depuis quelques années on s'est beaucoup intéressé aux phases amorphes et de nombreuses recherches sont engagées dans cette voie. Parallèlement on a réussi à fabriquer des semiconducteurs plus complexes mais plus intéressants sous de nombreux aspects, les alliages ternaires. Ceux-ci ont de nombreuses applications (laser, diodes émettrices, cellules photovoltaïques, détecteurs, etc.) pour lesquelles les composés binaires ou les semiconducteurs élémentaires ne peuvent pas toujours être utilisés, simplement parce que de nombreuses propriétés et en particulier les propriétés optiques (largeur de la bande interdite (gap), longueur d'onde des radiations émises sous certaines conditions, etc.) sont fixes et caractéristiques d'un matériau donné. La meilleure façon de changer ces propriétés est de changer de matériau et donc au besoin d'en créer de nouveaux ayant exactement les caractéristiques désirées.

Durant les dernières années, les techniques de fabrication d'alliage ternaires III-V se sont améliorées [J75, G78] et, en même temps différents modèles théoriques ont essayé de prédire les propriétés physiques

de ces nouveaux matériaux. Evidement, les modèles construits à priori se sont révélés partiellement inexacts et il a fallu réaliser diverses expériences afin de donner des bases plus solides aux nouvelles théories. Un des points les plus intéressants à cet égard est de savoir comment varie le schéma de bandes lorsque l'on passe d'un composé AC à un autre BC en faisant varier le pourcentage x de AC dans l'alliage $A_x B_{1-x} C$. Bien que certains paramètres comme les dimensions de la maille cristalline varient linéairement, d'autres tels le gap, les masses efficaces par exemple, varient de façon quadratique au moins en première approximation.

Plusieurs modèles théoriques ont été proposés dans les dernières années [V70, S74, C77, C78, H74] et tous ne s'accordent pas. En outre, l'accord avec l'expérience n'est pas toujours très bon non seulement parce que ces modèles sont approximatifs mais aussi parce que les paramètres fondamentaux sont déterminés expérimentalement par différentes expériences et qu'il est parfois difficile de les relier entre eux sans ambiguïté [H77].

Une des méthodes expérimentales les plus puissantes qui a permis d'étudier avec succès les composés binaires est la magnéto-optique inter-bande. Elle a entre autres avantages celui de donner avec une seule et unique expérience la majorité des paramètres fondamentaux du semiconducteur étudié. Nous avons donc entrepris l'étude de l'alliage $In_{1-x} Ga_x Sb$ par cette méthode. Le choix de cet alliage particulier est simple: InSb et GaSb sont assez bien connus et donnent donc deux points de départs solides, tous deux ont des masses efficaces d'électron assez faible pour pouvoir être étudiés avec le champ magnétique dont nous disposons et surtout, cet alliage a été fabriqué sur toute la gamme des compositions à Ottawa dans le groupe du Professeur J.C. Woolley et à Montpellier par le Dr. A. Joullié

qui ont bien voulu nous fournir les échantillons nécessaires à notre recherche.

Cet alliage a déjà été étudié par diverses méthodes et nous rappellerons les résultats obtenus en relation directe avec notre travail. Une bibliographie plus complète peut être trouvée dans les références citées ici.

Les études de croissance les plus importantes sur cet alliage [C69, J75] montrent que $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ peut être obtenu pour toutes les valeurs de x par la méthode Bridgmann ou par d'autres méthodes (Epitaxie en Phase Liquide (LPE) par exemple) et qu'un bon contrôle des procédures de croissance donne des spécimens homogènes. La plupart des échantillons ainsi réalisés sont polycristallins mais dans certains cas on peut isoler des microcristaux de dimensions assez importantes ($> \text{quelques mm}^3$). Des mesures de transport effectuées par les mêmes auteurs [C69, J75] ont montré que les alliages non dopés intentionnellement étaient de type n pour $x \lesssim 0.6$ (cette limite dépend de la préparation) et de type p au-delà. Des concentrations en porteurs de l'ordre de $10^{15} - 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ sont couramment obtenues. L'étude des propriétés électriques notamment par Coderre [C69] a permis d'obtenir divers paramètres de bandes comme par exemple la masse effective des électrons de la bande de conduction. Des expériences d'optiques [W61, A74] à température ambiante et à 80K ont montré que le gap direct $E_o(x)$ variait de façon non-linéaire à travers l'alliage. En outre, Title [T70] a mesuré le facteur de Landé g_c pour $x \leq 0.54$ par résonnance de spin électronique (ESR). Nous montrerons au cours de ce travail que la comparaison de certains résultats avec les calculs théoriques est particulièrement difficile du fait que les mesures ont été faites à diverses températures alors que les

modèles théoriques de base sont construits pour $T = 0$ K. Les comparaisons font donc intervenir des corrections le plus souvent semi-empiriques.

L'avantage de nos expériences est qu'elles sont faites à basse température (6K) rendant donc inutiles toutes les corrections apportées par d'autres auteurs. En outre, la plupart des paramètres importants sont obtenus ensemble et forment donc un groupe homogène. Parmi les différentes méthodes expérimentales qui permettent d'étudier la magnéto-optique interbande nous avons choisi d'utiliser l'effet photovoltaïque. La variation spectrale du photovoltage créé à une jonction métal-semi-conducteur est liée à la variation du coefficient d'absorption du semi-conducteur. Cette méthode a été utilisée par P. Rochon [R76] sur Ge, InP, InSb, GaAs entre autres et les excellents résultats obtenus nous ont conduit à l'employer pour $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$. Le meilleur modèle traitant de la magnéto-optique est celui développé par Pidgeon et Brown [P66] pour le cas particulier d'un semiconducteur monocristallin dans un champ magnétique orienté dans le plan $(1\bar{1}0)$. Nos échantillons étant polycristallins et l'anisotropie des niveaux de Landau étant observable nous avons d'abord dû établir une méthode d'analyse applicable à notre cas. Pour cela nous avons dans un premier temps généralisé le modèle de bandes couplées [P66] au cas d'un monocristal orienté de façon quelconque par rapport au champ, puis nous avons adapté ce modèle à l'analyse de résultats obtenus avec des polycristaux. Ce travail théorique fait l'objet du premier chapitre. L'utilisation de l'effet photovoltaïque et l'aspect expérimental sont abordés dans les deux chapitres suivants qui sont suivis de la présentation des résultats sur $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$. Enfin le dernier chapitre est consacré à l'étude de la variation des paramètres de bandes à travers l'alliage en

relation avec les résultats publiés par d'autres.

La conclusion finale permet de proposer quelques améliorations techniques et de suggérer des lignes de recherches futures. Quelques annexes concernant des points secondaires terminent ce travail.

C H A P I T R E I

SEMICONDUCTEUR DANS UN CHAMP MAGNETIQUE

- I. Modèle de Kane
- II. Schéma de bandes au point Γ pour InSb et GaSb
- III. Action du champ magnétique sur un monocristal
d'orientation arbitraire
 - A- Présentation du modèle de Kane pour un monocristal
en présence d'un champ magnétique
 - B- Développement du modèle
 - 1. Développement des termes Π_{jj} , et $D_{jj}^{\alpha\beta}$,
 - 2. Développement de $[(\sigma \times \Delta V) \cdot p]_{jj}$, et $(\sigma_3)_{jj}$,
 - 3. Eléments de la matrice d'interaction H'^{88}
- IV. Anisotropie des niveaux de Landau et des masses
efficaces
- V. Transitions interbandes dans un monocristal soumis à
un champ magnétique
 - A- Règles de sélection
 - B- Anisotropie des transitions interbandes
- VI. Application aux polycristaux
 - A- Elargissement des structures dans les expériences
de magnéto-optique interbande sur des échantillons
polycristallins
 - B- Analyse des transitions interbandes dans un
polycristal

The $\vec{k} \cdot \vec{p}$ Hamiltonian which treats exactly the interaction between the conduction band, the valence band and the split-off band at Γ in a monocrystalline III-V semiconductor in

a magnetic field of arbitrary orientation is developed.

The valence band anisotropy is studied with its effects on interband transitions, and selection rules are presented.

This coupled band model is then adapted to the study of polycrystalline materials.

C H A P I T R E I

SEMICONDUCTEUR DANS UN CHAMP MAGNETIQUE

Il existe de nombreuses méthodes qui permettent de calculer l'énergie des électrons dans un cristal. Les méthodes semi-empiriques ont l'avantage de simplifier les calculs en incluant un certain nombre de paramètres mesurés expérimentalement. En outre, et ceci est vrai pour tous les types de calcul, l'utilisation des propriétés de symétrie du cristal simplifie grandement la dimension du problème en réduisant le nombre de quantités à déterminer.

Une méthode qui s'est révélée très efficace pour les semi-conducteurs est la méthode dite " $\vec{k} \cdot \vec{p}$ " que nous allons résumer plus loin. On peut l'utiliser dans un calcul à priori mais aussi, et c'est ce que nous ferons dans ce travail, de façon semi-empirique en déterminant expérimentalement les paramètres de ce modèle. Ces paramètres sont essentiellement les séparations énergétiques entre diverses bandes (gaps) et les interactions entre ces bandes. On peut ainsi étudier les états d'énergie au voisinage d'un point de symétrie de la zone de Brillouin (Z B) ainsi que l'a fait Kane [K57] pour le point Γ dans le cas de InSb. Le modèle de Kane est maintenant largement utilisé et il est à la base des études de magnéto-optique car il peut être modifié assez facilement pour traiter le cas d'un semiconducteur soumis à un champ magnétique [L55, P66].

Les semiconducteurs que nous voulons étudier ont une symétrie de type Zinc-blende et le groupe du vecteur $\vec{k}$ au point Γ est donc T_d . En l'absence de perturbation de plus faible symétrie les transitions inter-bandes au voisinage de Γ sont donc isotropes et le modèle de Kane peut être appliqué indifféremment à des monocristaux ou des polycristaux. Par contre si l'on perturbe le semiconducteur, par exemple avec un champ

magnétique de direction fixe par rapport aux axes cristallins, on observe dans un monocristal sous illumination appropriée, des transitions entre niveaux de Landau dont l'énergie dépend de l'orientation du champ magnétique. Cette anisotropie des transitions provient de celle des niveaux de Landau. Ce modèle de magnéto-optique doit donc tenir compte de l'orientation du champ. Jusqu'à présent la méthode la plus précise est celle de Pidgeon et Brown [P66] qui traite du cas particulier où le champ est dans le plan $(1 \bar{1} 0)$.

Les échantillons que nous voulons étudier sont polycristallins car les alliages III-V sont difficiles à obtenir sous forme monocristalline. Il faut donc développer une méthode qui permette d'analyser les résultats expérimentaux en donnant le maximum d'informations. Autrement dit nous voulons pouvoir déduire, dans la mesure du possible, de nos expériences sur des polycristaux les paramètres de bandes qui caractérisent complètement dans le cadre de la méthode $\vec{k} \cdot \vec{p}$ les matériaux étudiés. Il faut donc, en particulier, tenir compte de l'anisotropie des niveaux de Landau. Dans tout ce qui suit nous considérons un échantillon polycristallin comme formé de microcristaux orientés selon diverses directions dans un certain angle solide Ω . Les deux cas extrêmes sont donc (a) des orientations quelconques réparties uniformément sur 4π , (b) un monocristal. Si l'on soumet l'échantillon à un champ magnétique fixe, chaque microcristal est perturbé indépendamment de son voisin et l'énergie des niveaux de Landau dans ce microcristal dépend de son orientation par rapport au champ. Si l'on éclaire l'échantillon avec des radiations d'énergie appropriée des transitions interbandes ont lieu dans chaque cristallite et l'énergie de ces transitions dépend de l'orientation de la cristallite. L'expérimentateur observe un effet global dû à toutes les cristallites formant l'échantillon. La

variation spectrale de l'absorption, par exemple, sera donc la somme des variations dues à chaque cristallite. On sait que les transitions entre niveaux de Landau donnent une allure oscillatoire au coefficient d'absorption. Les oscillations observées dans le cas d'un polycristal correspondront donc à des énergies moyennes de transition. Nous allons donc proposer une méthode qui permettra de calculer ces énergies moyennes en tenant compte de l'anisotropie des niveaux de Landau dans chaque microcristal. La comparaison des mesures expérimentales et des valeurs calculées donnera les paramètres de bandes caractérisant le semiconducteur.

Il faut donc dans un premier temps étendre le modèle de Pidgeon et Brown [P66] à un monocristal orienté de façon quelconque par rapport au champ magnétique. C'est ce que nous allons faire après avoir brièvement rappelé les bases du modèle de Kane. Nous terminerons en proposant une méthode d'analyse pour les expériences réalisées sur des polycristaux. Les problèmes soulevés par l'utilisation du modèle $\vec{k} \cdot \vec{p}$ dans les alliages ne sont pas abordés dans ce chapitre. Nous justifierons à posteriori son utilisation pour $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ dans le dernier chapitre lors de la comparaison de nos résultats avec ceux publiés par d'autres auteurs.

I. Modèle de Kane

Considérons l'hamiltonien monoélectronique suivant:

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + V(r) + \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} (\nabla V \times p) \cdot \sigma \quad (1)$$

où $\frac{p^2}{2m_0}$ représente l'énergie cinétique, $V(r)$ le potentiel cristallin périodique et σ l'opérateur associé aux matrices de Pauli. On sait que les solutions de l'équation de Schrödinger sont périodiques et peuvent s'écrire sous la forme suivante:

$$\psi_k = u_{nk}(r) e^{i \vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (2)$$

où $\vec{k}$ est le vecteur d'onde de l'électron dans le cristal. Si l'on substitue ψ_k donné par (2) dans l'équation de Schrödinger

$$H \psi_k = E_k \psi_k \quad (3)$$

on obtient

$$H_k u_{nk} = (E_k - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}) u_{nk} \quad (4)$$

avec

$$H_k = \frac{p^2}{2m} + V + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\nabla V \times \vec{p}) \cdot \sigma + \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} \vec{k} \cdot (\sigma \times \nabla V) + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} \quad (5)$$

Dans cet hamiltonien le 3ème terme représente l'interaction spin-orbite indépendante de k , le 4ème représente l'interaction spin-orbite dépendant de k . Comme cette interaction est beaucoup plus forte dans le coeur des atomes que pour les électrons des couches externes le 4ème terme a donc une petite contribution à l'énergie comparé au 3ème, on peut donc le négliger. Le 5ème terme est appelé l'interaction $\vec{k} \cdot \vec{p}$.

Si on connaît les valeurs propres et les fonctions propres au point k_0 , on peut, par une méthode de perturbation trouver les valeurs propres au point k si $k - k_0$ est petit. On développe alors u_{nk} suivant la base des u_{nk_0} :

$$u_{nk} = \sum_n f_{n'n, k-k_0} u_{n'k_0} \quad (6)$$

avec

$$H_0 u_{nk_0} = (E_{k_0} - \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m_0}) u_{nk_0} = \epsilon_0 u_{nk_0} \quad (7)$$

Si l'on utilise (6) et (7) avec H_k dans l'équation (3) on obtient:

$$\varepsilon_{j'} [(H_{k.p})_{jj'} + \varepsilon_{j'} \delta_{jj'}] f_{j'} = \varepsilon_j f_j \quad (8)$$

où l'on pose pour simplifier: $f_{n'n, k-k_0} = f_{j'}$,

$$\text{et } (H_{k.p})_{jj'} = \langle u_{j_0} | H_{k.p} | u_{j'_0} \rangle \quad (9)$$

On peut ramener l'équation (8) à une dimension finie en utilisant la méthode de perturbation développée par Dowdin [L51] dans laquelle on sépare les états en deux groupes: un groupe A que l'on veut traiter exactement et un groupe B éloigné en énergie du groupe A et que l'on traite comme une perturbation. On obtient alors

$$(H_{k.p})'_{jj'} = (H_{k.p})_{jj'} + \sum_i \frac{(H_{k.p})_{ji} (H_{k.p})_{ij'}}{\varepsilon_j - (H_{k.p})_{ii}} \quad (10)$$

où j, j' font partie de A et i fait partie de B. Les solutions de l'équation (8) dans laquelle on remplace $H_{k.p}$ par $H'_{k.p}$ donnent les énergies des états du groupe A.

II. Schéma de bandes au point Γ pour InSb et GaSb

Si on utilise cette méthode avec $k_0 = 0$ on obtient le schéma de bandes à Γ , qui est le même, qualitativement pour tous les semiconducteurs

III-V. On s'intéresse aux 8 états formant:

- i) le bas de la bande de conduction (2)
- ii) le haut de la bande de valence (4)
- iii) la bande dite "split-off" séparée de la bande de valence par l'interaction spin-orbite (2)

On obtient le schéma de la figure 1. Le groupe du vecteur $\vec{k}$ au point

TABLEAU I 1

Représentations irréductibles du groupe T_j^+

Dresselhauss [D55]	Γ_1 Γ_2 Γ_3 Γ_4 Γ_5 Γ_6 Γ_7 Γ_8
Koster [K63]	Γ_1 Γ_2 Γ_3 Γ_5 Γ_4 Γ_6 Γ_7 Γ_8
Bassani [B75]	Γ_1 Γ_2 Γ_{12} Γ_{15} Γ_{25} Γ_6 Γ_7 Γ_8

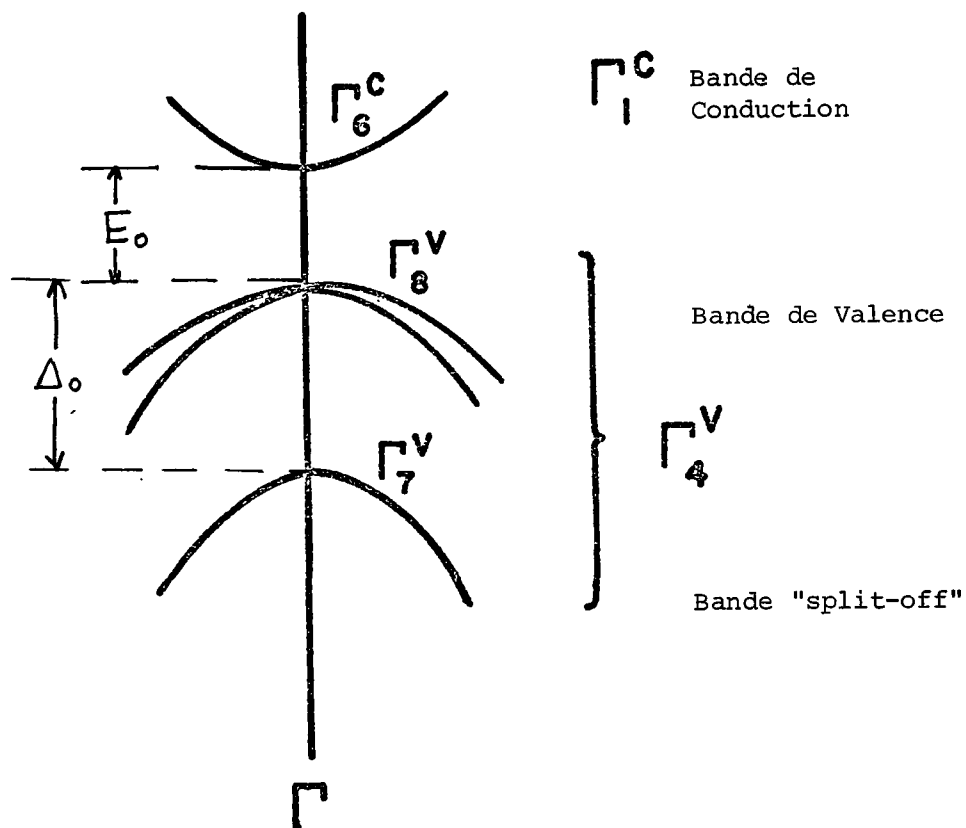


Figure 1

Schéma de bandes au point Γ (semiconducteur III-V)

Γ est T_d , les notations utilisées pour les représentations irréductibles du groupe simple et du groupe double dans notre travail sont celles de Dresselhaus [D55] reprises par Kane [K57]. La correspondance de ces notations avec celles employées par d'autres auteurs est donnée par le tableau II. (Voir aussi Annexe A).

III. Action du champ magnétique sur un monocristal d'orientation arbitraire.

Si un champ magnétique H orienté suivant une direction quelconque agit sur un monocristal, l'hamiltonien de ce dernier est modifié par l'interaction champ-semiconducteur. On représente le champ magnétique par un potentiel Vecteur $\vec{A}$ et l'on obtient alors:

$$H = \frac{1}{2m_0} \left(\vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c} \right)^2 + \frac{\hbar}{4m_0} \frac{1}{2} \frac{1}{c^2} \left[\nabla \nabla \times \left(\vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c} \right) \right] \cdot \sigma - \frac{e}{2m_0 c} \sigma \cdot H + V(r)$$

(11)

On définit un repère direct orthonormé (1, 2, 3) avec H suivant la direction (3) (figure 2) et on choisit

$$A = H (-x_2, 0, 0)$$

On sait depuis Landau [L30] que les solutions de l'équation de Schrödinger sont périodiques suivant (1 et 3) et quantifiées en niveaux d'oscillateur harmonique suivant (2).

Luttinger et Kohn [L55] ont utilisé le modèle de Kane en incluant dans le groupe A seulement les états Γ_7 et Γ_8 de la figure 1. Pidgeon et Brown [P66] ont inclu Γ_6 dans le groupe A pour étudier InSb lorsque H est dans le plan (1 $\bar{1}$ 0). Cette méthode a été utilisée par la suite pour de nombreux composés III-V [Voir par exemple A72]. Nous voulons développer ici la méthode de Pidgeon et Brown dans le cas général d'un champ magnétique

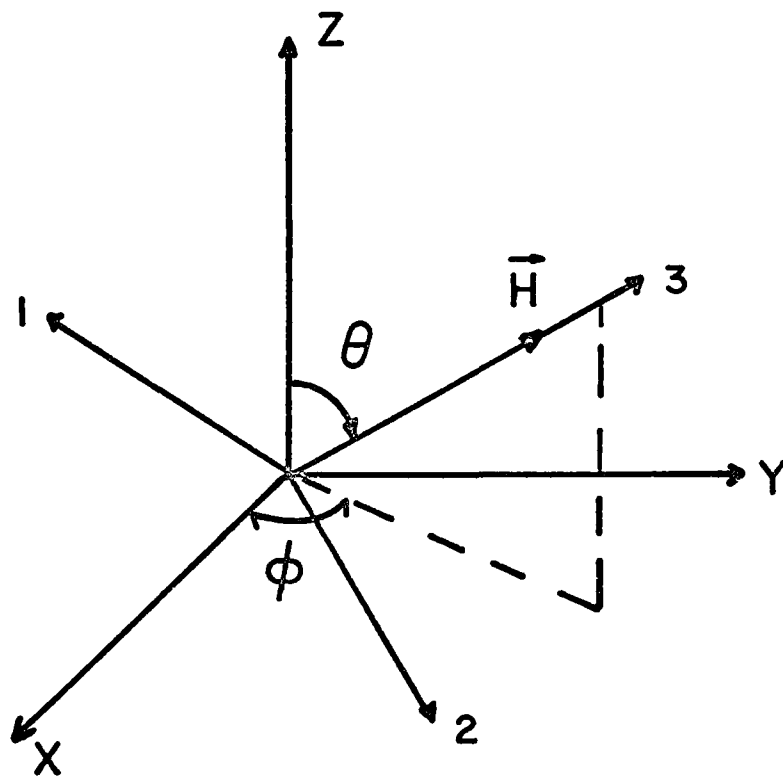


Figure 2

Orientation du champ magnétique par rapport aux axes
cristallins

orienté de façon quelconque par rapport aux axes cristallins.

A- Présentation du modèle de Kane pour un monocristal en présence d'un champ magnétique.

Si l'on utilise le modèle de Kane avec l'opérateur défini par (11) on est conduit à développer les fonctions d'onde comme en (6). A l'ordre zéro on a: $\psi_{j'} = \sum_j f_j u_{j0}$ avec [G67]:

$$f_{j'}(r) \propto (L_1 L_2)^{-\frac{1}{2}} \exp [ik_1 x_1 + ik_3 x_3] \phi_n^{j'}(x_2 - \frac{\hbar c k_1}{e H}) = \overline{f}_{j'}(r) \quad (12)$$

$\overline{f}_{j'}(r)$ est normalisée sur un volume $L_1 L_2 L_3$ et $\phi_n^{j'}$ est une fonction d'oscillateur harmonique monodimensionnel. L'équation (8) pour un semiconducteur en présence d'un champ magnétique s'écrit alors:

$$\sum_{j'} \left\{ D_{jj'}^{\alpha\beta} k_\alpha k_\beta + \Pi_{jj'}^\alpha k_\alpha + \frac{1}{2} \delta (\sigma_3)_{jj'} + \frac{1}{4c^2} [(\sigma \times \Delta V) \cdot p]_{jj'} + \epsilon_{jj'} \delta_{jj'} \right\} f_{j'}(r) = \epsilon_j f_j(r) \quad (13)$$

où

$$D_{jj'}^{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \delta_{jj'} \delta_{\alpha\beta} + \sum_i \frac{\Pi_{ji}^\alpha \Pi_{ij'}^\beta}{\epsilon'_0 - \epsilon_i} \quad (14)$$

et

$$\Pi_{jj'} = \int u_{j0}^*(r) \left(p - \frac{1}{4c^2} (\Delta V \times \sigma) \right) u_{j'0}(r) dr \quad (15)$$

j et j' sont les indices des 8 états considérés, i est l'indice utilisé pour les autres bandes.

α, β prennent les valeurs 1, 2, 3 et on a posé $\hbar = 1, m_0 = 1$

et $\delta = \frac{e H}{c}$ (Voir Annexe B pour ce qui concerne les unités de champ magnétique)

Les fonctions de base u_{k_0} sont celles qui diagonalisent l'interaction spin-orbite, c'est à dire:

$$\begin{aligned}
u_{10} &= | S \uparrow \downarrow \rangle \\
u_{20} &= | i S \downarrow \uparrow \rangle \\
u_{30} &= \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (X + iY) \uparrow \downarrow \right\rangle \\
u_{40} &= \left| \frac{i}{\sqrt{2}} (X - iY) \downarrow \uparrow \right\rangle \\
u_{50} &= \left| \frac{1}{\sqrt{6}} [(X - iY) \uparrow + 2 Z \downarrow] \right\rangle \\
u_{60} &= \left| \frac{i}{\sqrt{6}} [(X + iY) \downarrow - 2 Z \uparrow] \right\rangle \\
u_{70} &= \left| \frac{i}{\sqrt{3}} [-(X - iY) \uparrow + Z \downarrow] \right\rangle \\
u_{80} &= \left| \frac{1}{\sqrt{3}} [(X + iY) \downarrow + Z \uparrow] \right\rangle
\end{aligned} \tag{16}$$

Les fonctions u_{10} et u_{20} appartiennent à Γ_6 et se transforment comme les fonctions de moment total (J, M_J) avec $J = \frac{1}{2}$, $M_J = \pm \frac{1}{2}$; u_{30} , u_{40} , u_{50} , u_{60} appartiennent à Γ_8 et se transforment comme $(\frac{3}{2}, \frac{3}{2})$, $(\frac{3}{2}, -\frac{3}{2})$, $(\frac{3}{2}, -\frac{1}{2})$, $(\frac{3}{2}, \frac{1}{2})$; u_{70} et u_{80} appartiennent à Γ_7 et se transforment comme $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ et $(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2})$.

S est une fonction de type Δ et X , Y , Z sont des fonctions de type p . Les signes $\uparrow$ et $\downarrow$ correspondent aux spins $\frac{1}{2}$ et $-\frac{1}{2}$; les signes $(')$ signifient que les fonctions sont écrites suivant le repère $(1, 2, 3)$ et non suivant le repère (x, y, z) formé par les axes du cristal (figure 2). Par exemple

$[X \uparrow]' = X' \uparrow' = X_1 \uparrow'$ où $\uparrow'$ est une fonction de spin suivant la direction

3. L'équation (13) peut se mettre sous forme matricielle, l'hamiltonien d'interaction sera donc de dimension 8×8 . On peut le réduire à deux matrices 4×4 lorsqu'on prend $k_3 = 0$. Cette approximation peut être faite si l'on s'intéresse aux transitions optiques entre la bande de valence ou split-off et la bande de conduction car la densité conjointe d'états a un maximum pour $k_3 = 0$ [G67]. Une fois la matrice d'interaction établie il faut trouver une matrice unitaire $U(H)$ qui la diagonalise pour obtenir l'énergie des niveaux de Landau.

B- Développement du modèle

Nous allons maintenant montrer comment l'on peut développer l'équation (13) pour une orientation quelconque du champ magnétique.

Lorsqu'on évalue les termes comme (14) et (15) on a avantage à utiliser les propriétés de symétrie des fonctions et des opérateurs pour réduire l'ampleur du calcul. Pour cela il faut que les intégrales qui apparaissent dans ces termes soient écrites dans le repère (x, y, z) du cristal puisque ce sont ces axes qui servent à définir les symétries.

Nous allons donc réécrire chaque terme de (13) suivant (x, y, z) On passe du système $(1, 2, 3)$ au système (x, y, z) par des matrices de rotation qui sont les suivantes:

$$\begin{bmatrix} X' \\ Y' \\ Z' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta \cos \phi & \cos \theta \sin \phi & -\sin \theta \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ \sin \theta \cos \phi & \sin \theta \sin \phi & \cos \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X \\ Y \\ Z \end{bmatrix}$$

(17)

$$S = S'$$

$$\begin{bmatrix} \uparrow' \\ \downarrow' \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} e^{-\frac{i\phi}{2}} \cos \frac{\theta}{2} & e^{i\frac{\phi}{2}} \sin \frac{\theta}{2} \\ -e^{-\frac{i\phi}{2}} \sin \frac{\theta}{2} & e^{i\frac{\phi}{2}} \cos \frac{\theta}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \uparrow \\ \downarrow \end{bmatrix} \quad (18)$$

Les fonctions u_k données par (16) s'écrivent donc:

$$u_{10} = |S(e^{-\frac{i\phi}{2}} \cos \frac{\theta}{2} \uparrow + e^{\frac{i\phi}{2}} \sin \frac{\theta}{2} \downarrow)\rangle = |S(+)\rangle$$

$$u_{20} = |iS(-e^{-\frac{i\phi}{2}} \sin \frac{\theta}{2} \uparrow + e^{\frac{i\phi}{2}} \cos \frac{\theta}{2} \downarrow)\rangle = |iS(-)\rangle$$

$$u_{30} = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} [(\cos \theta \cos \phi - i \sin \phi) X + (\cos \theta \sin \phi + i \cos \phi) Y - \sin \theta Z] (+) \right\rangle$$

$$u_{40} = \left| \frac{i}{\sqrt{2}} [(\cos \theta \cos \phi + i \sin \phi) X + (\cos \theta \sin \phi - i \cos \phi) Y - \sin \theta Z] (-) \right\rangle$$

$$u_{50} = \left| \frac{1}{\sqrt{6}} [\{(\cos \theta \cos \phi + i \sin \phi) X + (\cos \theta \sin \phi - i \cos \phi) Y - \sin \theta Z\} (+) + 2\{\sin \theta \cos \phi X + \sin \theta \sin \phi Y + \cos \theta Z\} (-)] \right\rangle$$

$$u_{60} = \left| \frac{i}{\sqrt{6}} [\{(\cos \theta \cos \phi - i \sin \phi) X + (\cos \theta \sin \phi + i \cos \phi) Y - \sin \theta Z\} (-) - 2\{\sin \theta \cos \phi X + \sin \theta \sin \phi Y + \cos \theta Z\} (+)] \right\rangle$$

$$u_{70} = \left| \frac{i}{\sqrt{3}} [-\{(\cos \theta \cos \phi + i \sin \phi) X + (\cos \theta \sin \phi - i \cos \phi) Y - \sin \theta Z\} (-) + \{\sin \theta \cos \phi X + \sin \theta \sin \phi Y + \cos \theta Z\} (+)] \right\rangle$$

$$u_{80} = \left| \frac{1}{\sqrt{3}} [\{(\cos \theta \cos \phi - i \sin \phi) X + (\cos \theta \sin \phi + i \cos \phi) Y - \sin \theta Z\} (+) + \{\sin \theta \cos \phi X + \sin \theta \sin \phi Y + \cos \theta Z\} (-)] \right\rangle$$

(19)

Les signes (+) et (-) sont définis par les deux premières relations (19).

De la même manière les composantes de $\vec{p}$ s'écrivent

$$\begin{aligned} p_1 &= \cos \theta \cos \phi p_x + \cos \theta \sin \phi p_y - \sin \theta p_z \\ p_2 &= -\sin \phi p_x + \cos \phi p_y \\ p_3 &= \sin \theta \cos \phi p_x + \sin \theta \sin \phi p_y + \cos \theta p_z \end{aligned} \quad (20)$$

1) Développement des termes $\Pi_{jj'}^\alpha$, et $D_{jj'}^{\alpha\beta}$

En négligeant le second terme de la relation (15) comme précédemment, on calcule $\Pi_{jj'}^\alpha$, pour $\alpha = 1, 2, 3$

$$\begin{aligned} \Pi_{jj'}^1 &= \int u_{j0}^* (\cos \theta \cos \phi p_x + \cos \theta \sin \phi p_y - \sin \theta p_z) u_{j'0} d\tau \\ \Pi_{jj'}^2 &= \int u_{j0}^* (-\sin \phi p_x + \cos \phi p_y) u_{j'0} d\tau \\ \Pi_{jj'}^3 &= \int u_{j0}^* (\sin \theta \cos \phi p_x + \sin \theta \sin \phi p_y + \cos \theta p_z) u_{j'0} d\tau \end{aligned} \quad (21)$$

Ces termes sont à développer pour chaque couple (j, j') donné par les relations (19).

De la même façon, dans

$$\begin{aligned} D_{jj'}^{\alpha\beta} &= \frac{3}{2} \delta_{jj'} + \sum_i \frac{\langle u_{j0} | p_1 | u_{i0} \rangle \langle u_{i0} | p_1 | u_{j'0} \rangle}{\varepsilon'_0 - \varepsilon_i} \\ &\quad + \sum_i \frac{\langle u_{j0} | p_1 | u_{i0} \rangle \langle u_{i0} | p_2 | u_{j'0} \rangle}{\varepsilon'_0 - \varepsilon_i} \\ &\quad + \sum_i \frac{\langle u_{j0} | p_1 | u_{i0} \rangle \langle u_{i0} | p_3 | u_{j'0} \rangle}{\varepsilon'_0 - \varepsilon_i} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_i \frac{\langle u_{j0} | p_2 | u_{i0} \rangle \langle u_{i0} | p_1 | u_{j'0} \rangle}{\epsilon'_0 - \epsilon_i} \\
& + \sum_i \frac{\langle u_{j0} | p_2 | u_{i0} \rangle \langle u_{i0} | p_2 | u_{j'0} \rangle}{\epsilon'_0 - \epsilon_i} \\
& + \sum_i \frac{\langle u_{j0} | p_2 | u_{i0} \rangle \langle u_{i0} | p_3 | u_{j'0} \rangle}{\epsilon'_0 - \epsilon_i} \\
& + \sum_i \frac{\langle u_{j0} | p_3 | u_{i0} \rangle \langle u_{i0} | p_1 | u_{j'0} \rangle}{\epsilon'_0 - \epsilon_i} \\
& + \sum_i \frac{\langle u_{j0} | p_3 | u_{i0} \rangle \langle u_{i0} | p_2 | u_{j'0} \rangle}{\epsilon'_0 - \epsilon_i} \\
& + \sum_i \frac{\langle u_{j0} | p_3 | u_{i0} \rangle \langle u_{i0} | p_3 | u_{j'0} \rangle}{\epsilon'_0 - \epsilon_i}
\end{aligned}$$

(22)

on développe p_1, p_2, p_3 et $u_{j0}, u_{j'0}$ avec les relations (19) et (20).

Dans les développements (21) et (22) on voit alors apparaître des termes comme par exemple:

$$\begin{aligned}
& \langle x | p_x | z \rangle \\
& \langle s | p_x | z \rangle
\end{aligned} \tag{23}$$

$$\text{ou} \quad \sum_i \frac{\langle x | p_x | u_{i0} \rangle \langle u_{i0} | p_y | y \rangle}{\epsilon'_0 - \epsilon_i} \tag{24}$$

En utilisant la théorie des Groupes on peut, sans calcul numérique, prédire les termes qui seront nuls et ceux qui seront égaux entre eux. Il suffit pour cela de regarder comment les fonctions de bases et les opérateurs se transforment sous l'action des opérations de T_d . Le tableau I2 donne les

TABLEAU I 2

Fonctions de base des représentations irréductibles

de T_d et T_d^+ [D55]

Groupe Simple T_d		Groupe Double T_d^+	
Γ_1	$\alpha = 1$	Γ_6	$\alpha \uparrow\rangle$ $i\alpha \downarrow\rangle$
Γ_2	$\beta = [x^4(y^2 - z^2) + y^4(z^2 - x^2) + z^4(x^2 - y^2)]$	Γ_7	$\beta \downarrow\rangle$ $\beta \uparrow\rangle$
Γ_3	$\gamma_1 = x^2 + \omega y^2 + \omega^2 z^2$ $\gamma_2 = x^2 + \omega^2 y^2 + \omega z^2$ avec $\omega^3 = 1$	Γ_8	$\frac{1}{\sqrt{2}} (\omega^2 \gamma_2 + \omega \gamma_1) \uparrow\rangle$ $-\frac{i}{\sqrt{2}} (\omega^2 \gamma_2 - \omega \gamma_1) \downarrow\rangle$ $\frac{i}{\sqrt{2}} (\omega^2 \gamma_2 - \omega \gamma_1) \uparrow\rangle$ $-\frac{1}{\sqrt{2}} (\omega^2 \gamma_2 + \omega \gamma_1) \downarrow\rangle$
Γ_4	$\delta_1 = x$ $\delta_2 = y$ $\delta_3 = z$	$\Gamma_7(\Gamma_4^{1/2})$	$\frac{1}{\sqrt{3}} [-i(\delta_1 - \delta_2) \uparrow\rangle + i\delta_3 \downarrow\rangle]$ $\frac{1}{\sqrt{3}} [(\delta_1 + i\delta_2) \downarrow\rangle + \delta_3 \uparrow\rangle]$
		$\Gamma_8(\Gamma_4^{3/2})$	$\frac{i}{\sqrt{2}} (\delta_1 - i\delta_2) \downarrow\rangle$ $\frac{1}{\sqrt{6}} [(\delta_1 - i\delta_2) \uparrow\rangle + 2\delta_3 \downarrow\rangle]$ $\frac{1}{\sqrt{6}} [i(\delta_1 + i\delta_2) \downarrow\rangle - 2i\delta_3 \uparrow\rangle]$ $\frac{1}{\sqrt{2}} (\delta_1 + i\delta_2) \uparrow\rangle$

Γ_5	$\varepsilon_1 = x(y^2 - z^2)$ $\varepsilon_2 = y(z^2 - x^2)$ $\varepsilon_3 = z(x^2 - y^2)$	$\Gamma_6(\Gamma_5^{1/2})$	$\frac{1}{\sqrt{3}} [-i(\varepsilon_1 - i\varepsilon_2) \uparrow\rangle + \varepsilon_3 \downarrow\rangle]$ $\frac{1}{\sqrt{3}} [i(\varepsilon_1 + i\varepsilon_2) \downarrow\rangle - \varepsilon_3 \uparrow\rangle]$
		$\Gamma_8(\Gamma_5^{3/2})$	$\frac{i}{\sqrt{2}} (\varepsilon_1 - i\varepsilon_2) \downarrow\rangle$ $\frac{1}{\sqrt{6}} [i(\varepsilon_1 - i\varepsilon_2) \uparrow\rangle + 2\varepsilon_3 \downarrow\rangle]$ $\frac{1}{\sqrt{6}} [i(\varepsilon_1 + i\varepsilon_2) \downarrow\rangle + 2\varepsilon_3 \uparrow\rangle]$ $\frac{i}{\sqrt{2}} (\varepsilon_1 + i\varepsilon_2) \uparrow\rangle$

Note: Les symboles grecs utilisés dans ce tableau pour les fonctions de base n'ont aucun lien avec les mêmes symboles utilisés au cours de ce travail pour représenter d'autres quantités.

fonctions de base des représentations irréductibles de T_d et T_d^+ nécessaires à cette analyse.

A l'aide de ce tableau on peut montrer que les termes non nuls apparaissant dans le développement de $D_{jj}^{\alpha\beta}$, sont les suivants

a) $\mu_{10}(\Gamma_1); \mu_{j0}$ et $\mu_{j'0}(\Gamma_4)$

$$\begin{aligned}
 \langle X | p_x | \alpha \rangle \langle \alpha | p_x | X \rangle &= \langle Y | p_y | \alpha \rangle \langle \alpha | p_y | Y \rangle \\
 &= \langle Z | p_z | \alpha \rangle \langle \alpha | p_z | Z \rangle \\
 &= \langle X | p_x | \alpha \rangle \langle \alpha | p_y | Z \rangle \\
 &= \langle X | p_x | \alpha \rangle \langle \alpha | p_y | Y \rangle \\
 &= \langle Y | p_y | \alpha \rangle \langle \alpha | p_z | Z \rangle
 \end{aligned} \tag{25}$$

b) $\mu_{10}(\Gamma_3); \mu_{j0}$ et $\mu_{j'0}(\Gamma_4)$

$$\begin{aligned}
 &\langle X | p_x | \sigma_1 \rangle \langle \sigma_1 | p_x | X \rangle + \langle X | p_x | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | p_x | X \rangle \\
 &= \langle Y | p_y | \sigma_1 \rangle \langle \sigma_1 | p_y | Y \rangle + \langle Y | p_y | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | p_y | Y \rangle \\
 &= \langle Z | p_z | \sigma_1 \rangle \langle \sigma_1 | p_z | Z \rangle + \langle Z | p_z | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | p_z | Z \rangle \\
 &= -2 \{ \langle X | p_x | \sigma_1 \rangle \langle \sigma_1 | p_z | Z \rangle + \langle X | p_x | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | p_z | Z \rangle \} \\
 &= -2 \{ \langle Y | p_y | \sigma_1 \rangle \langle \sigma_1 | p_z | Z \rangle + \langle Y | p_y | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | p_z | Z \rangle \} \\
 &= -2 \{ \langle X | p_x | \sigma_1 \rangle \langle \sigma_1 | p_y | Y \rangle + \langle X | p_x | \sigma_2 \rangle \langle \sigma_2 | p_y | Y \rangle \}
 \end{aligned} \tag{26}$$

c) $\mu_{10}(\Gamma_4); \mu_{j0} \text{ et } \mu_{j'0}(\Gamma_4)$

$$\begin{aligned}
 \langle x | p_y | \delta_3 \rangle \langle \delta_3 | p_y | x \rangle &= \langle y | p_x | \delta_3 \rangle \langle \delta_3 | p_x | y \rangle \\
 &= \langle y | p_z | \delta_1 \rangle \langle \delta_1 | p_z | y \rangle \\
 &= \langle z | p_y | \delta_1 \rangle \langle \delta_1 | p_y | z \rangle \\
 &= \langle z | p_x | \delta_2 \rangle \langle \delta_2 | p_x | z \rangle \\
 &= \langle x | p_z | \delta_2 \rangle \langle \delta_2 | p_z | x \rangle \\
 &= \langle y | p_x | \delta_3 \rangle \langle \delta_3 | p_y | x \rangle \\
 &= \langle z | p_y | \delta_1 \rangle \langle \delta_1 | p_z | y \rangle \\
 &= \langle x | p_z | \delta_2 \rangle \langle \delta_2 | p_x | z \rangle
 \end{aligned} \tag{27}$$

d) $\mu_{10}(\Gamma_5); \mu_{j0} \text{ et } \mu_{j'0}(\Gamma_4)$

$$\begin{aligned}
 \langle x | p_y | \epsilon_3 \rangle \langle \epsilon_3 | p_y | x \rangle &= \langle y | p_x | \epsilon_3 \rangle \langle \epsilon_3 | p_x | y \rangle \\
 &= \langle y | p_z | \epsilon_1 \rangle \langle \epsilon_1 | p_z | y \rangle \\
 &= \langle z | p_y | \epsilon_1 \rangle \langle \epsilon_1 | p_y | z \rangle \\
 &= \langle z | p_x | \epsilon_2 \rangle \langle \epsilon_2 | p_x | z \rangle \\
 &= \langle x | p_z | \epsilon_2 \rangle \langle \epsilon_2 | p_z | x \rangle \\
 &= -\langle y | p_x | \epsilon_3 \rangle \langle \epsilon_3 | p_y | x \rangle \\
 &= -\langle z | p_y | \epsilon_1 \rangle \langle \epsilon_1 | p_z | y \rangle \\
 &= -\langle x | p_z | \epsilon_2 \rangle \langle \epsilon_2 | p_x | z \rangle
 \end{aligned} \tag{28}$$

e) $\mu_{10}(\Gamma_4); \mu_{j0} \text{ et } \mu_{j'0}(\Gamma_1)$

$$\begin{aligned}
 \langle s | p_x | \delta_1 \rangle \langle \delta_1 | p_x | s \rangle &= \langle s | p_y | \delta_2 \rangle \langle \delta_2 | p_y | s \rangle \\
 &= \langle s | p_z | \delta_3 \rangle \langle \delta_3 | p_z | s \rangle
 \end{aligned} \tag{29}$$

On peut regrouper tous les termes égaux pour chaque bande d'indice n et de symétrie Γ_i . On définit alors: (Voir Annexe A)

$$\begin{aligned}
 A &= \sum_{n,l} \frac{|\langle X | p_x | \Gamma_1(n,l) \rangle|^2}{\epsilon_0 - \epsilon_n} \\
 B &= \sum_{n,l} \frac{|\langle X | p_x | \Gamma_3(n,l) \rangle|^2}{\epsilon_0 - \epsilon_n} \\
 C &= \sum_{n,l} \frac{|\langle X | p_y | \Gamma_4(n,l) \rangle|^2}{\epsilon_0 - \epsilon_n} \\
 D &= \sum_{n,l} \frac{|\langle X | p_y | \Gamma_5(n,l) \rangle|^2}{\epsilon_0 - \epsilon_n} \\
 F &= \sum_{n,l} \frac{|\langle S | p_x | \Gamma_4(n,l) \rangle|^2}{\epsilon_0 - \epsilon_n}
 \end{aligned} \tag{30a}$$

où la somme se fait sur les ℓ fonctions de base de n bandes de symétrie Γ_i .

$$\text{Un autre paramètre } G = \sum_{n,l} \frac{\langle S | p_x | \Gamma_4(n,l) \rangle \langle \Gamma_4(n,l) | p_y | Z \rangle}{\epsilon_0 - \epsilon_n}$$

apparaît dans le développement de $D_{jj}^{\alpha\beta}$, mais Pidgeon et Brown [P66] ont montré qu'on pouvait le négliger.

Les éléments non nuls de Π_{jj}^α , peuvent être exprimés à partir d'un paramètre:

$$P = -i \langle S | p_z | Z \rangle \tag{30b}$$

2) Développement de $[(\sigma \times \Delta V) \cdot p]_{jj}$, et $(\sigma_3)_{jj}$,

On a choisi comme fonctions u_{j0} celles qui diagonalisent l'interaction spin-orbite, le terme $[(\sigma \times \Delta V) \cdot p]_{jj}$, n'aura une contribution que

pour les termes diagonaux de la matrice d'interaction et cette contribution est définie en fonction du paramètre usuel d'interaction spin-orbite [K57].

$$\Delta_o = \frac{3i}{4} \langle x | \frac{\partial V}{\partial x} p_y - \frac{\partial V}{\partial y} p_x | y \rangle \quad (31)$$

Ici encore, la symétrie du problème a permis de regrouper les termes non nuls en un seul paramètre.

Pour $(\sigma_3)_{jj}$, il est inutile de transformer les fonctions de base (16) puisque l'axe 3 a été choisi comme axe de quantification. Si l'on utilise l'opérateur de spin

$$\sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

pour chaque couple $u_{j0}, u_{j'0}$ on obtient des éléments diagonaux et des éléments d'interaction entre u_{50} et u_{70} d'une part, u_{60} et u_{80} d'autre part.

3) Eléments de la matrice d'interaction H'^{88}

Les approximations utilisées ($G = 0$ et $k_3 = 0$) permettent de réduire H'^{88} à deux matrice 4 x 4 suivant le schéma:

$$H'^{88} = \begin{pmatrix} H'^{44}_a & 0 \\ 0 & H'^{44}_b \end{pmatrix} \quad (32)$$

Autrement dit les 8 états considérés sont séparés en deux ensembles a et b qui n'interagissent pas. Il est avantageux de définir les paramètres suivants:

$$\begin{aligned}
\gamma_1 &= -\frac{2}{3} m_0 (A + B + 2C + 2D) - 1 \\
\gamma_2 &= -\frac{1}{3} m_0 (A + B - C - D) \\
\gamma_3 &= -\frac{1}{3} m_0 (A - \frac{B}{2} + C - D) \\
\kappa &= -\frac{1}{3} m_0 (A - \frac{B}{2} - C + D) - \frac{1}{3}
\end{aligned} \tag{33}$$

Ce sont les paramètres modifiés de Luttinger [P66]. De nombreux termes dans différents éléments de matrice sont anisotropes. On définit donc les fonctions suivantes qui permettent de simplifier l'écriture:

$$\begin{aligned}
\gamma'_{\theta\phi} &= \gamma_3 + (\gamma_3 - \gamma_2) f(\theta, \phi) \\
\gamma''_{\theta\phi} &= \frac{1}{3} \gamma_2 + \frac{2}{3} \gamma_3 + \frac{1}{6} (\gamma_3 - \gamma_2) f(\theta, \phi) \\
f(\theta, \phi) &= \frac{3}{4} \sin^2 \theta [\cos^2 \theta (4 - \sin^2 2\phi) + \sin^2 2\phi] - 1 \\
g(\theta, \phi) &= \frac{3}{4} \sin^2 \theta [\cos^2 \theta (4 - \sin^2 2\phi) - \sin^2 2\phi] \\
h(\theta, \phi) &= \frac{1}{2} \sin^2 2\theta \cos \theta \cos 2\phi \sin 2\phi \\
\ell(\theta, \phi) &= \frac{1}{2} \cos \theta \cos 2\phi \sin 2\phi (\sin^2 \theta - 2) \\
m(\theta, \phi) &= 2 \left(\frac{1}{3} + \cos^2 \theta \sin^2 2\phi \right)
\end{aligned} \tag{34}$$

Finalement on utilise le fait que k_1 et k_2 ne commutent pas en présence d'un champ magnétique [L56].

$$(k_1, k_2) = \frac{\delta}{i}$$

donc, p et q définis par

$$\begin{aligned}
p &= \frac{1}{\sqrt{\delta}} k_1 \\
q &= \frac{1}{\sqrt{\delta}} k_2
\end{aligned}$$

sont des variables canoniques. On peut donc définir a et a^+ opérateurs d'annihilation et de création par:

$$\begin{aligned} a^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (p + iq) \\ a &= \frac{1}{\sqrt{2}} (p - iq) \end{aligned} \quad (35)$$

avec les propriétés suivantes:

$$\begin{aligned} \text{i)} \quad (a, a^+) &= 1 \\ \text{ii)} \quad \frac{1}{2}(p^2 + q^2) u_n &= (a^+ a + \frac{1}{2}) u_n = (n + \frac{1}{2}) u_n \\ N &= a^+ a \\ N u_n &= n u_n \\ \text{iii)} \quad a u_n &= n^{\frac{1}{2}} u_{n-1} \\ a^+ u_n &= (n + 1)^{\frac{1}{2}} u_{n+1} \end{aligned} \quad (36)$$

si u_n est une fonction d'oscillateur harmonique. On peut enfin décomposer

H_a^{44} et H_b^{44} chacune en une somme de deux matrices, la seconde agissant comme une perturbation sur la première. On obtient donc:

$$\begin{aligned} H_a^{44} &= H_{oa}^{44} + H_{la}^{44} \\ H_b^{44} &= H_{ob}^{44} + H_{lb}^{44} \end{aligned} \quad (37)$$

Les éléments de H_{oa}^{44} , H_{ob}^{44} et H_{la}^{44} sont présentés dans le tableau I3.

H_{lb}^{44} a des éléments similaires à ceux de H_{la}^{44} . Comme les deux matrices ne seront pas utilisées par la suite nous n'en présentons qu'une à titre d'exemple.

T A B L E A U I 3

ELEMENTS DES MATRICES D'INTERACTION

(j, j')	$H'_{oa}{}^{44}$ (38)	$H'_{ob}{}^{44}$ (39)	
(1,1)	$E_o + 2sF(N + \frac{1}{2}) + s(N + 1)$	$E_o + 2sF(N + \frac{1}{2}) + sN$	(2,2)
(1,3)	$i s^{\frac{1}{2}} P a^+$	$i (\frac{s}{3})^{\frac{1}{2}} P a^+$	(2,6)
(1,5)	$i (\frac{s}{3})^{\frac{1}{2}} P a$	$i s^{\frac{1}{2}} P a$	(2,4)
(1,7)	$(\frac{2}{3}s)^{\frac{1}{2}} P a^+$	$(\frac{2s}{3})^{\frac{1}{2}} P a^+$	(2,8)
(3,3)	$- s [(\gamma_1 + \gamma'_{\theta\phi})(N + \frac{1}{2}) + \frac{3}{2}\kappa]$	$- s [(\gamma_1 - \gamma'_{\theta\phi})(N + \frac{1}{2}) + \frac{1}{2}\kappa]$	(6,6)
(3,5)	$- s \sqrt{3} \gamma'_{\theta\phi} a^2$	$- s \sqrt{3} \gamma'_{\theta\phi} a^2$	(6,4)
(3,7)	$i s \sqrt{6} \gamma'_{\theta\phi} a^2$	$i s \sqrt{2} [\gamma'_{\theta\phi}(N + \frac{1}{2}) + \frac{1}{2}(\kappa + 1)]$	(6,8)
(5,5)	$- s [(\gamma_1 - \gamma'_{\theta\phi})(N + \frac{1}{2}) - \frac{1}{2}\kappa]$	$- s [(\gamma_1 + \gamma'_{\theta\phi})(N + \frac{1}{2}) - \frac{3}{2}\kappa]$	(4,4)
(5,7)	$i s \sqrt{2} [\gamma'_{\theta\phi}(N + \frac{1}{2}) - \frac{1}{2}(\kappa + 1)]$	$i s \sqrt{6} \gamma'_{\theta\phi} a^{+2}$	(4,8)
(7,7)	$- s [\gamma_1(N + \frac{1}{2}) - (\kappa + \frac{1}{2})] - \Delta_o$	$- s [\gamma_1(N + \frac{1}{2}) + (\kappa + \frac{1}{2})] - \Delta_o$	(8,8)

$$H'_{1a}{}^{44} \quad (40)$$

$$(1, 1) = (1, 3) = (1, 5) = (1, 7) = (7, 7) = 0$$

$$(3, 3) = - s \left[\frac{a^2 + a^{+2}}{2} g(\theta, \phi) + 3 \operatorname{Im} a^{+2} h(\theta, \phi) \right] (\gamma_2 - \gamma_3) = (5, 5)$$

$$(3, 5) = - s U(\gamma_2 - \gamma_3); \quad (3, 7) = i s \sqrt{2} U(\gamma_2 - \gamma_3);$$

$$(5, 7) = - i s \sqrt{2} \left[g(\theta, \phi) \left(\frac{a^2 + a^{+2}}{2} \right) + 3 i h(\theta, \phi) \left(\frac{a^{+2} - a^2}{2} \right) \right] (\gamma_2 - \gamma_3)$$

$$U = a^{+2} \left[m(\theta, \phi) - \frac{1}{3} f(\theta, \phi) \right] - \frac{2}{3} \left[g(\theta, \phi) + 3 i \ell(\theta, \phi) \right] (N + \frac{1}{2})$$

$$- i \left[\ell(\theta, \phi) + \frac{h(\theta, \phi)}{\cos \theta} \right] (a^{+2} - a^2)$$

L'ordre dans lequel nous avons classé les fonctions u_{j0} dans chaque ensemble (a et b) est le même que celui de Pidgeon et Brown [P66] afin de faciliter la comparaison. Il faut noter quelques erreurs dans les matrices publiées dans [P66], elles ont été corrigées à d'autres endroits [Voir par exemple A72]. On peut vérifier que pour $\phi = 45^\circ$ les matrices données par (38), (39) et (40) dans le tableau I3 se réduisent à celles développées par Pidgeon et Brown pour le cas particulier où le champ magnétique est dans le plan $(1 \bar{1} 0)$.

Si l'on néglige les faibles perturbations $H'_{1a}{}^{44}$ et $H'_{1b}{}^{44}$, l'équation (13) peut s'écrire sous forme matricielle comme suit:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} H'_{0a}{}^{44} & - E_a I^{44} \end{pmatrix} f_a &= 0 \\ \begin{pmatrix} H'_{0b}{}^{44} & - E_b I^{44} \end{pmatrix} f_b &= 0 \end{aligned} \quad (41)$$

avec:

$$f_a = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_3 \\ f_5 \\ f_7 \end{pmatrix} \text{ et } f_b = \begin{pmatrix} f_2 \\ f_6 \\ f_4 \\ f_8 \end{pmatrix} \quad (42)$$

Les fonctions f_i ($i = 1, \dots, 8$) sont proportionnelles à des fonctions d'oscillateur harmonique (équation (12)) et l'on peut voir par inspection que les solutions de (41) sont telles que:

$$\begin{aligned} f_1 &= \mu_1 \phi_n & f_2 &= \mu_2 \phi_n \\ f_3 &= \mu_3 \phi_{n-1} & f_6 &= \mu_6 \phi_{n-1} \\ f_5 &= \mu_5 \phi_{n+1} & f_4 &= \mu_4 \phi_{n+1} \\ f_7 &= \mu_7 \phi_{n+1} & f_8 &= \mu_8 \phi_{n-1} \end{aligned} \quad (43)$$

Si l'on veut calculer l'énergie d'un niveau d'indice n de l'une des bandes considérées (Bandes de conduction, de valence et split-off) il suffit de diagonaliser les matrices des équations (41) pour cette valeur de n . Les paramètres du modèle sont E_0 , Δ_0 , F , P , γ_1 , γ_2 et γ_3 définis au cours de ce chapitre. A tout ensemble de tels paramètres il faut ajouter les angles θ et ϕ qui spécifient l'orientation du champ magnétique. Le but de notre travail est de déterminer les paramètres ci-dessus pour toute valeur de x dans l'alliage $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$. Avant de poursuivre et de voir comment l'expérience permet de déterminer ces paramètres nous allons considérer l'effet de l'orientation du champ par rapport au cristal et donc étudier l'anisotropie des niveaux de Landau et des masses efficaces au point Γ .

Les matrices des équations (41) n'ont pas de solutions analytiques exactes. Il faut donc avoir recours à une diagonalisation numérique. Si l'on fixe l'intensité du champ on peut à partir d'un ensemble connu de paramètres étudier le comportement des niveaux en fonction de leur indice et de l'orientation. C'est ce que nous avons fait pour InSb et GaSb. Seuls les résultats sur InSb sont présentés ici, ceux concernant GaSb se trouvent dans l'Annexe C.

IV. Anisotropie des niveaux de Landau et des masses efficaces.

Nous avons utilisé un ensemble de paramètres de bandes publié par Pidgeon et al [P66, P67] pour InSb et diagonalisé H_{oa}^{44} et H_{ob}^{44} pour plusieurs valeurs de n et du champ magnétique ainsi que pour diverses orientations de ce dernier. Les matrices H_{la}^{44} et H_{lb}^{44} seront négligées dans tout le reste de ce travail car elles n'apportent que de faibles changements aux énergies calculées, non observés dans la plupart des expériences de magnéto-optique. Afin de ne pas compliquer inutilement

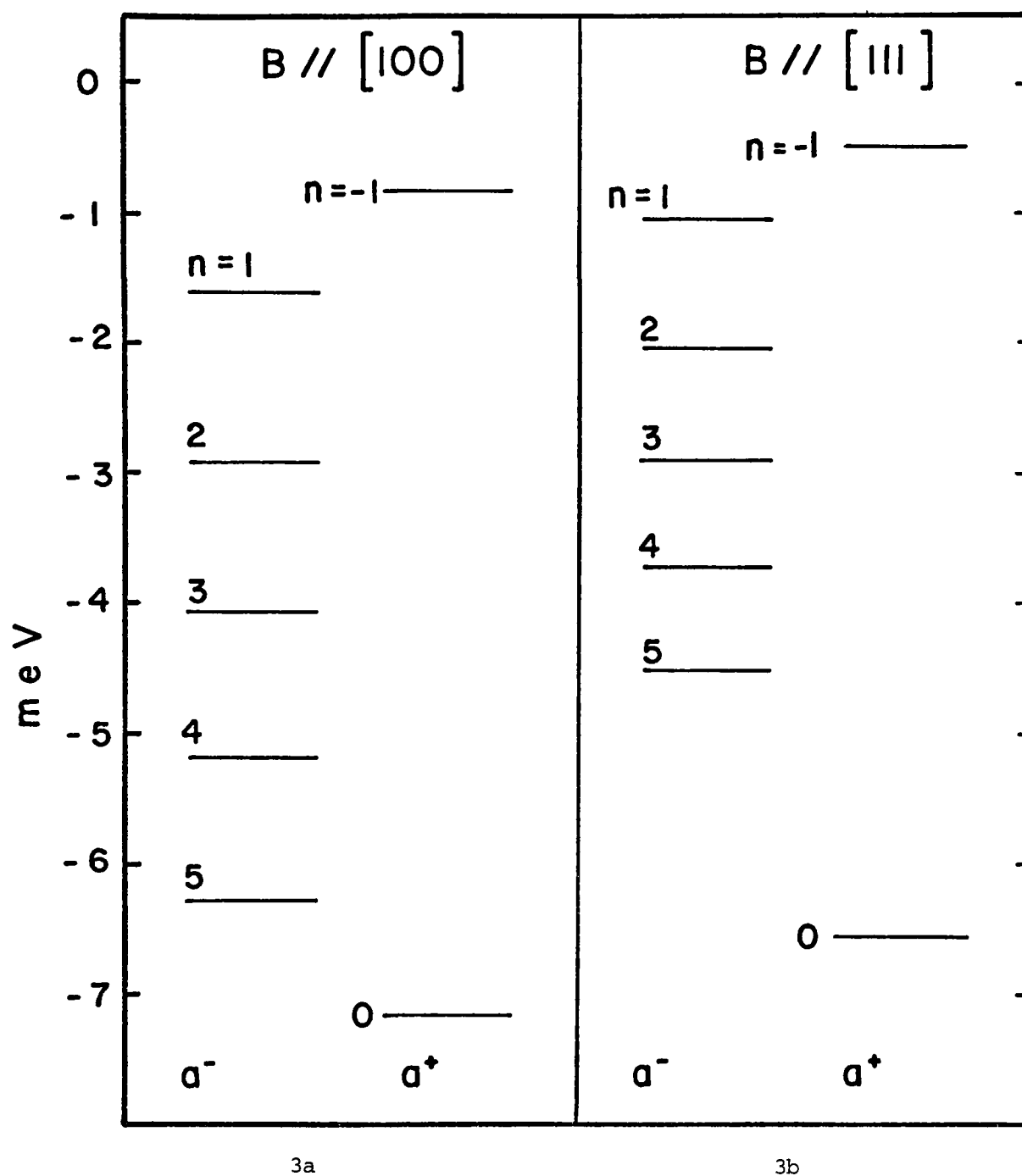


Figure 3

Niveaux de Landau dans InSb (Ensemble a; trous lourds a^- et légers a^+)

B//[100] 3a, B//[111] 3b

les figures nous n'avons représenté que les niveaux de l'ensemble a définis par H_{oa}^{44} (table I3). L'allure générale des courbes est la même pour d'autres valeurs du champ que celle présentée ici ($B = 3T$) et pour d'autres semiconducteurs III-V ainsi que le montrent les calculs effectués sur GaSb et présentés dans l'annexe C.

La figure 3a représente les premiers niveaux des trous lourds a^- et légers a^+ de la bande de valence calculés pour un champ parallèle à $[100]$. On remarque l'espacement irrégulier des niveaux dû à la dégénérescence de la bande de valence au point Γ [P66]. Cette irrégularité apparaît pour toutes les orientations mais elle varie suivant θ et ϕ comme on peut le constater en comparant la figure 3a à la figure 3b qui correspond à un champ parallèle à $[111]$.

On peut aussi mettre en évidence l'anisotropie d'un niveau donné et c'est ce que nous avons fait sur la figure 4 où nous avons représenté les niveaux $n=3$ calculés pour $B = 3T$. On peut décrire qualitativement la variation de ces niveaux à l'aide d'équations approximatives. Les équations (41) peuvent être développées sous forme de déterminants et l'on obtient des termes dépendant du champ magnétique jusqu'à l'ordre 4. On peut développer les solutions en série de $\Delta = \frac{eH}{c}$

$$E = E^{(0)} + E^{(1)}\Delta + E^{(2)}\Delta^2 + E^{(3)}\Delta^3 + \dots \quad (44)$$

et remplacer E par ce développement dans le déterminant. On regroupe les termes de puissances égales de Δ ce qui donne les coefficients $E^{(0)}$, $E^{(1)}$, $E^{(2)}$ pour chaque bande. Les coefficients d'indice élevé sont compliqués et nous n'avons calculé que les premiers.

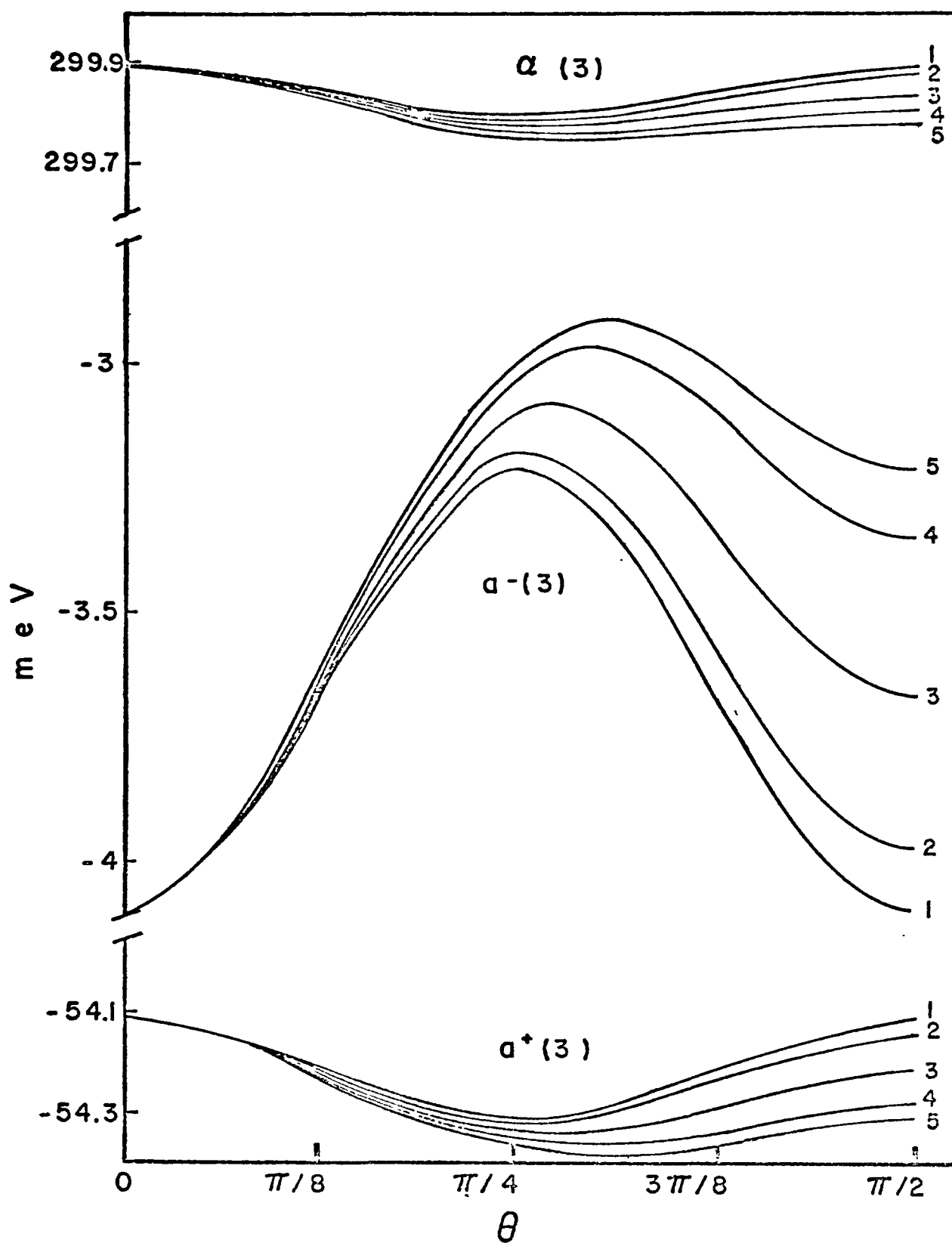


Figure 4

Anisotropie des niveaux $n=3$ à $B=3T$ dans InSb α : bande de conduction
 a^- : trous lourds, a^+ : trous légers $1 \rightarrow \phi = 0$, $2 \rightarrow \phi = \frac{\pi}{16}$, $3 \rightarrow \phi = \frac{\pi}{8}$,
 $4 \rightarrow \phi = \frac{3\pi}{16}$, $5 \rightarrow \phi = \frac{\pi}{4}$

Pour l'ensemble a on obtient les développements suivants:

i) bande de conduction

$$E_c^\alpha = E_o + \left\{ (n + \frac{1}{2}) \left[1 + 2F + \frac{E_p}{3} \left(\frac{2}{E_o} + \frac{1}{E_o + \Delta_o} \right) \right] \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \left[1 - \frac{E_p}{3} \left(\frac{1}{E_o} - \frac{1}{E_o + \Delta_o} \right) \right] \right\} s + E_c^{(2)}(\theta, \phi) s^2 + \dots \quad (45)$$

ii) trous lourds

$$E_{hh}^{a-} = - \left\{ \left[(n - \frac{3}{2}) \gamma_1^L - \gamma_{\theta\phi}^L + \frac{1}{2} \kappa^L \right] + \left[(\gamma_1^L - (n - \frac{3}{2}) \gamma_{\theta\phi}^L - \kappa^L)^2 \right. \right. \\ \left. \left. + 3n(n+1) (\gamma_{\theta\phi}^L)^2 \right] \frac{1}{2} \right\} s + E_{hh}^{a(2)}(\theta, \phi) s^2 + \dots \quad (46)$$

iii) trous légers

$$E_{lh}^{a+} = - \left\{ \left[(n - \frac{3}{2}) \gamma_1^L - \gamma_{\theta\phi}^L + \frac{1}{2} \kappa^L \right] - \left[(\gamma_1^L - (n - \frac{3}{2}) \gamma_{\theta\phi}^L - \kappa^L)^2 \right. \right. \\ \left. \left. + 3n(n+1) (\gamma_{\theta\phi}^L)^2 \right] \frac{1}{2} \right\} s + E_{lh}^{a(2)}(\theta, \phi) s^2 + \dots \quad (47)$$

où l'on a posé:

$$\gamma_1^L = \gamma_1 + \frac{E_p}{3E_o} \\ \gamma_{\theta\phi}^L = \gamma_{\theta\phi} + \frac{E_p}{6E_o} \\ \gamma_{\theta\phi}^{'L} = \gamma_{\theta\phi}' + \frac{E_p}{6E_o} \\ \kappa^L = \kappa + \frac{E_p}{6E_o} \\ E_p = \frac{2m_o P^2}{\hbar^2} \quad (48)$$

Des équations du même genre peuvent être obtenues pour l'ensemble b et la bande "split-off".

On voit sur l'équation (45) que l'énergie des niveaux de la bande de conduction est isotrope au premier ordre en δ ce qui explique la faible variation du niveau représenté sur la figure 4. Par contre le coefficient de δ pour les trous lourds (équation 46) dépend fortement de l'orientation par l'intermédiaire de $\gamma'_{\theta\phi}$ et $\gamma''_{\theta\phi}$. La variation des trous légers est plus faible que celle des trous lourds bien que le coefficient de δ dépende de θ et ϕ , simplement parce que ce coefficient est la différence de deux termes dont les effets se compensent partiellement (équation 47).

Les variations relatives maximum pour les niveaux représentés sur la figure 4 sont:

$$\begin{aligned}
 \frac{\Delta E_c^\alpha}{|E_{c[100]}^\alpha + E_{c[111]}^\alpha|/2} &= \pm 0.02\% \\
 \frac{\Delta E_{hh}^{a-}}{|E_{hh[100]}^{a-} + E_{hh[111]}^{a-}|/2} &= \pm 17\% \\
 \frac{\Delta E_h^{a+}}{|E_{lh[100]}^{a+} + E_{lh[111]}^{a+}|/2} &= \pm 0.2\%
 \end{aligned} \tag{49}$$

On peut de la même façon étudier l'anisotropie des masses efficaces des trous lourds et légers au point Γ . Le résultat de nos calculs pour InSb est représenté sur les figures 5 et 6. Les développements (46) et (47) permettent d'obtenir une forme approximative pour ces masses en fonction

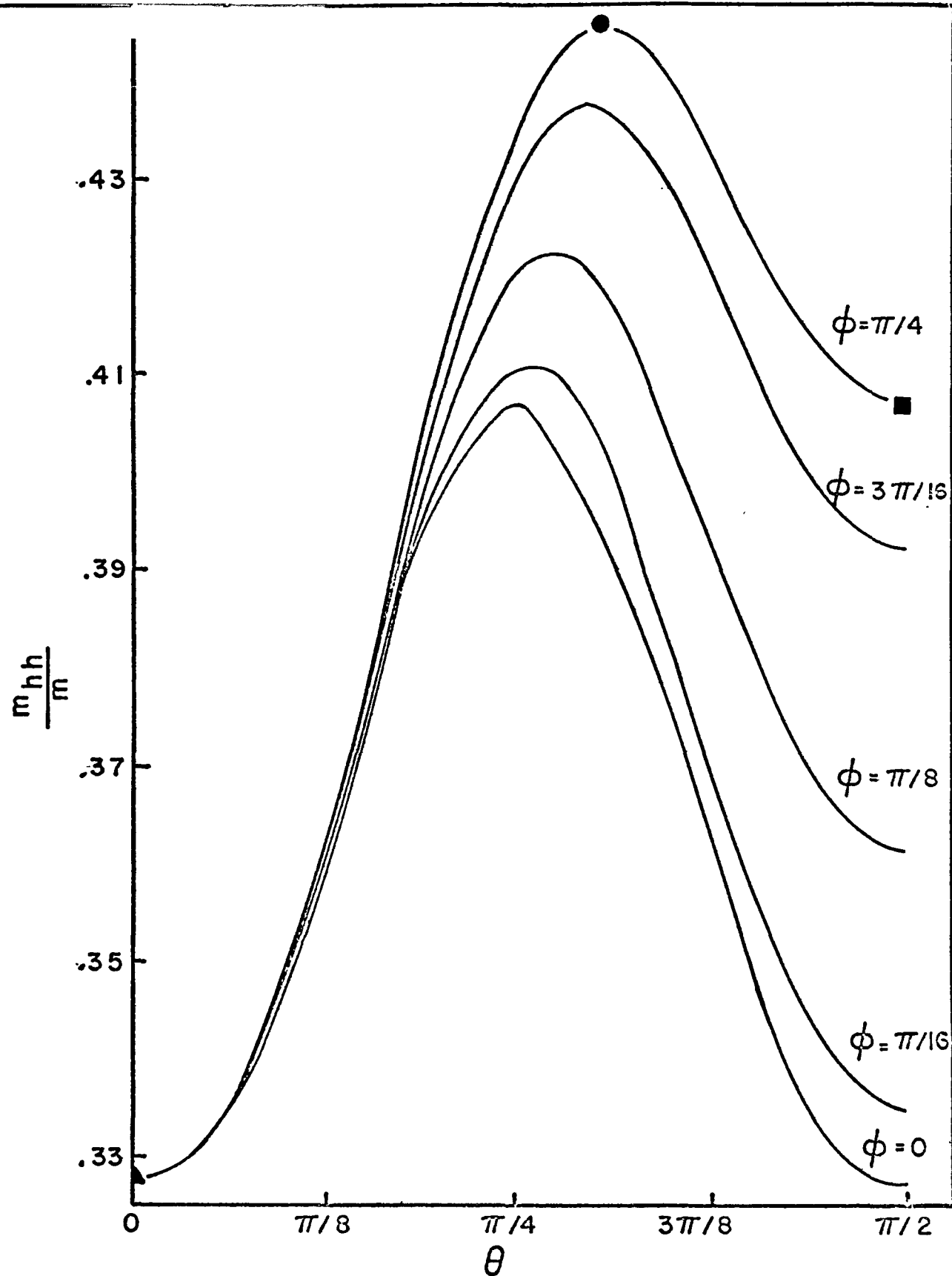


Figure 5

Anisotropie de la masse des trous lourds (m_{hh}) dans InSb au point Γ .

▲ $\rightarrow$ [100] , ● $\rightarrow$ [111] , ■ $\rightarrow$ [110]

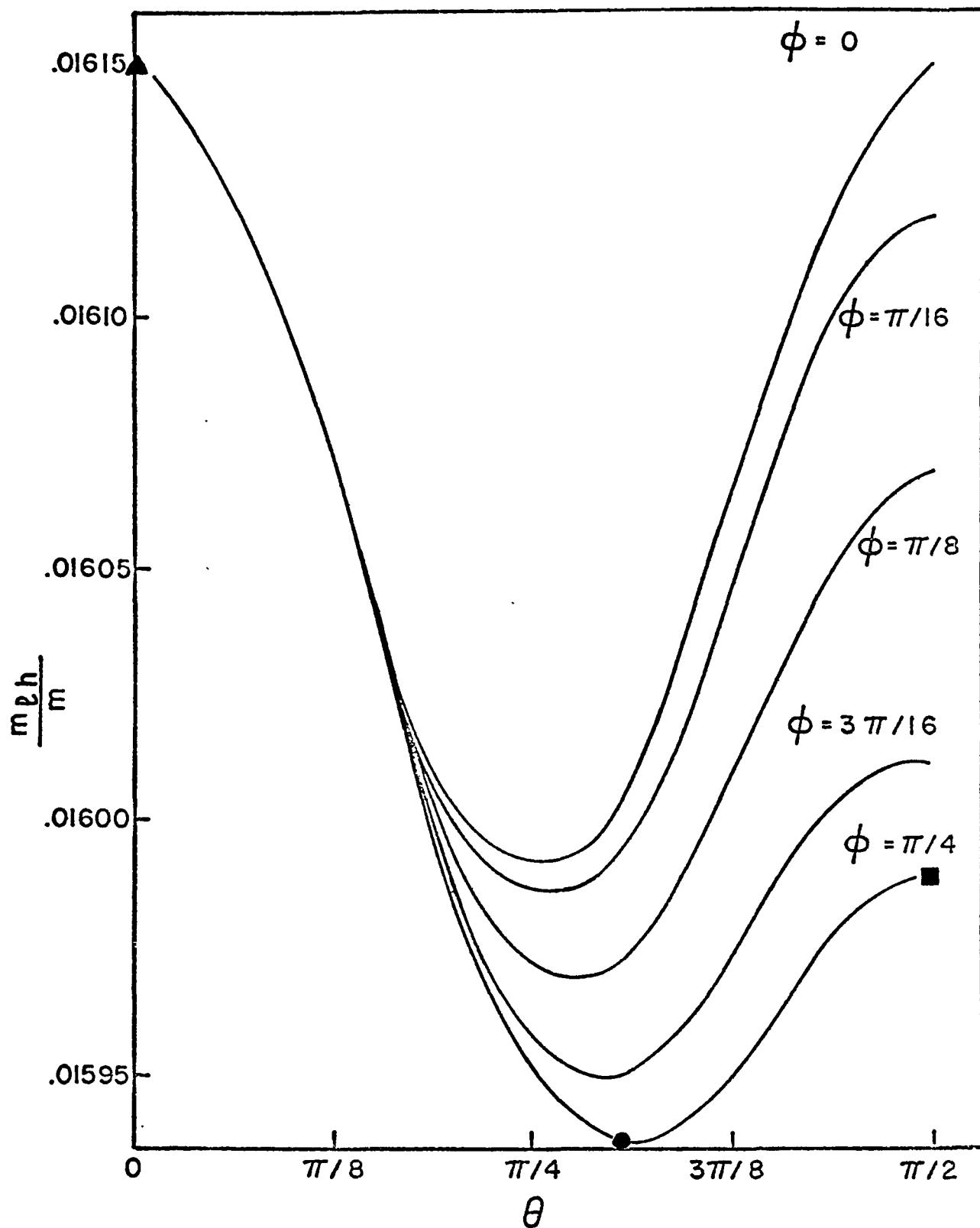


Figure 6

Anisotropie de la masse des trous légers (m_{lh}) dans InSb au point Γ .

▲ $\rightarrow [100]$, ● $\rightarrow [111]$, ■ $\rightarrow [110]$

de la direction:

i) trous lourds

$$\frac{m_{hh}}{m_o} = [\gamma_1^L - ((\gamma_{\theta\phi}^L)^2 + 3(\gamma_{\theta\phi}^{'L})^2)^{\frac{1}{2}}]^{-1}$$

ii) trous légers

$$\frac{m_{lh}}{m_o} = [\gamma_1^L + ((\gamma_{\theta\phi}^L)^2 + 3(\gamma_{\theta\phi}^{'L})^2)^{\frac{1}{2}}]^{-1}$$

On peut déterminer les variations maximum relatives pour m_{hh} et m_{lh} à partir des figures 5 et 6 et l'on obtient $\pm 16\%$ pour la première, $\pm 0.7\%$ pour la seconde. La faible variation de la masse des trous légers explique pourquoi les valeurs expérimentales sont citées en général sans tenir compte de l'anisotropie.

Le modèle des bandes couplées développé pour une orientation quelconque du champ magnétique met donc en évidence l'anisotropie des niveaux de Landau au point Γ . Les paramètres de bandes qui apparaissent dans ce modèle sont essentiellement ceux du modèle de Kane. La Théorie des Groupes a permis de réduire au minimum le nombre de paramètres nécessaires. On ne peut, à moins de faire des simplifications non physiques, en diminuer encore le nombre. En effet les interactions interbandes F , P , γ_1 , γ_2 , γ_3 sont nécessaires à une description réaliste minimum des bandes de conduction, de valence et split-off. On peut, et nous y reviendrons dans la discussion des résultats expérimentaux, traiter l'interaction de ces bandes avec la seconde bande de conduction de symétrie p au point Γ de façon exacte en incluant cette bande dans le groupe A principal de la méthode de Löwdin

(Voir équation 10 de ce chapitre); mais on ne peut pas, par exemple négliger l'une quelconque des interactions décrites par les paramètres ci-dessus. Le modèle que nous venons de développer est donc nécessaire à l'étude de la magnéto-optique pour une description satisfaisante des phénomènes physiques observables dans des monocristaux. Nous verrons qu'il est important de conserver toutes ces caractéristiques lorsqu'on étudie des polycristaux, dans la mesure où les expériences sur de tels spécimens font intervenir les mêmes phénomènes essentiels comme par exemple l'anisotropie des niveaux de Landau due aux interactions interbandes.

Avant d'en venir aux polycristaux il nous reste à relier notre modèle théorique à l'expérience. Différentes techniques expérimentales peuvent être utilisées et nous avons choisi l'étude des transitions interbandes. Elles peuvent être mises en évidence dans les spectres d'absorption, de réflectivité, directs ou modulés. Chaque technique a ses avantages et nous en avons choisi une qui a prouvé son efficacité pour de nombreux semiconducteurs [R76]: l'étude de l'absorption par l'intermédiaire de l'effet photovoltaïque. Nous décrirons la méthode expérimentale plus loin; pour l'instant nous dirons simplement que la variation spectrale du photovoltage est liée à celle du coefficient d'absorption. Nous allons maintenant rappeler brièvement les règles de sélections pour les transitions interbandes; nous montrerons aussi que l'anisotropie des niveaux de Landau se retrouve dans les spectres d'absorption.

V. Transitions interbandes dans un monocristal soumis à un champ magnétique.

A. Règles de sélection

On peut montrer [Voir par exemple B75] que la densité d'états dans chaque bande présente des singularités correspondant à chaque niveau

de Landau. Pour un cas simple où les bandes sont isotropes on obtient:

$$J(E, H) = \frac{2 e H}{\hbar^2 c} (2 m^*)^{\frac{1}{2}} \sum_n [E - E_0 - \hbar \omega_c (n + \frac{1}{2})]^{-\frac{1}{2}} \quad (51)$$

où m^* représente la masse efficace et ω_c la fréquence cyclotronique. C'est pour cela que l'on observe de nombreux effets oscillatoires dans les propriétés de transport en présence d'un champ magnétique et c'est aussi l'origine des oscillations dans les constantes optiques correspondant à des transitions entre niveaux de Landau.

En utilisant la méthode habituelle [Voir par exemple H44] , on peut calculer les probabilités de transition et établir les règles de sélections pour les transitions interbandes. Le calcul a été fait par plusieurs auteurs [Voir par exemple R59] et nous ne présenterons ici que les grandes lignes.

Lorsqu'une radiation de fréquence ω et de polarisation ϵ

$$A_{el} = A_0 (\vec{\epsilon} e^{i\omega t} - \vec{\epsilon}^* e^{-i\omega t}) \quad (53)$$

interagit avec un semiconducteur soumis à un champ magnétique décrit par le potentiel vecteur A , on peut décrire l'interaction en incluant à l'hamiltonien du semiconducteur un terme de perturbation:

$$H_{el} = \frac{eA_0}{m_0} (\vec{p} - \frac{eA}{c}) \cdot \frac{1}{2i\omega} (\vec{\epsilon} e^{i\omega t} - \vec{\epsilon}^* e^{-i\omega t}) \quad (54)$$

L'élément de matrice d'interaction entre les états ψ_i^n et $\psi_j^{n'}$ s'écrit

$$M = \int \psi_i^{n*} H_{el} \psi_j^{n'} dr \quad (55)$$

Si l'on utilise comme fonctions ψ celles qui diagonalisent H_{oa}^{44} et H_{ob}^{44} ,

c'est à dire si on néglige le couplage entre les ensembles a et b [P 69]
ces fonctions s'écrivent, à partir de la relation (6)

$$\psi_j^n(r) = \sum_{\ell} U_{\ell j}^n \overline{f}_{\ell}^n(r) u_{\ell 0}(r) \quad (56)$$

où $\overline{f}_{\ell}^n(r)$ est défini par (12) et $U_{\ell j}^n$ est un élément de la matrice unitaire qui diagonalise H ,⁴⁴. En substituant (53) et (56) dans (55) on obtient deux termes, le premier représentant la résonance cyclotron intrabande, le second représentant les transitions interbandes. Ce dernier s'écrit

$$M^{\text{int}} \approx \frac{eA_0}{m} \sum_{\ell, k} U_{\ell k}^* U_{kj} \int \overline{f}_{\ell}^* \overline{f}_k u_{\ell 0}^* (\vec{p} \cdot \vec{\epsilon}) u_{k0} dr \quad (57)$$

où l'on a allégé l'écriture en n'écrivant pas les indices n. Comme $\vec{A}$ et les fonctions $\overline{f}$ varient peu sur une cellule unitaire on peut séparer (57) en deux intégrales.

$$M^{\text{int}} \approx \frac{eA_0}{m} \sum_{\ell, k} U_{\ell k}^* U_{kj} \frac{1}{V_0} \int_{\text{cristal}} \overline{f}_{\ell}^* \overline{f}_k dr \int_{\text{cellule}} u_{\ell 0}^* \vec{p} \cdot \vec{\epsilon} u_{k0} dr \quad (58)$$

Les conditions d'annulation des deux intégrales donnent les règles de sélection. Les relations (12) et (15) donnent $\overline{f}$ et u , et pour les transitions entre bande de valence (ou split-off) et la bande de conduction on obtient:

$$\Delta m_j = 0, \pm 1 \quad (59)$$

$$\Delta n = \pm 1 \quad (60)$$

Dans la configuration de Faraday (propagation de la lumière parallèlement au champ magnétique) seules les transitions ayant $\Delta m_j = \pm 1$ sont autorisées.

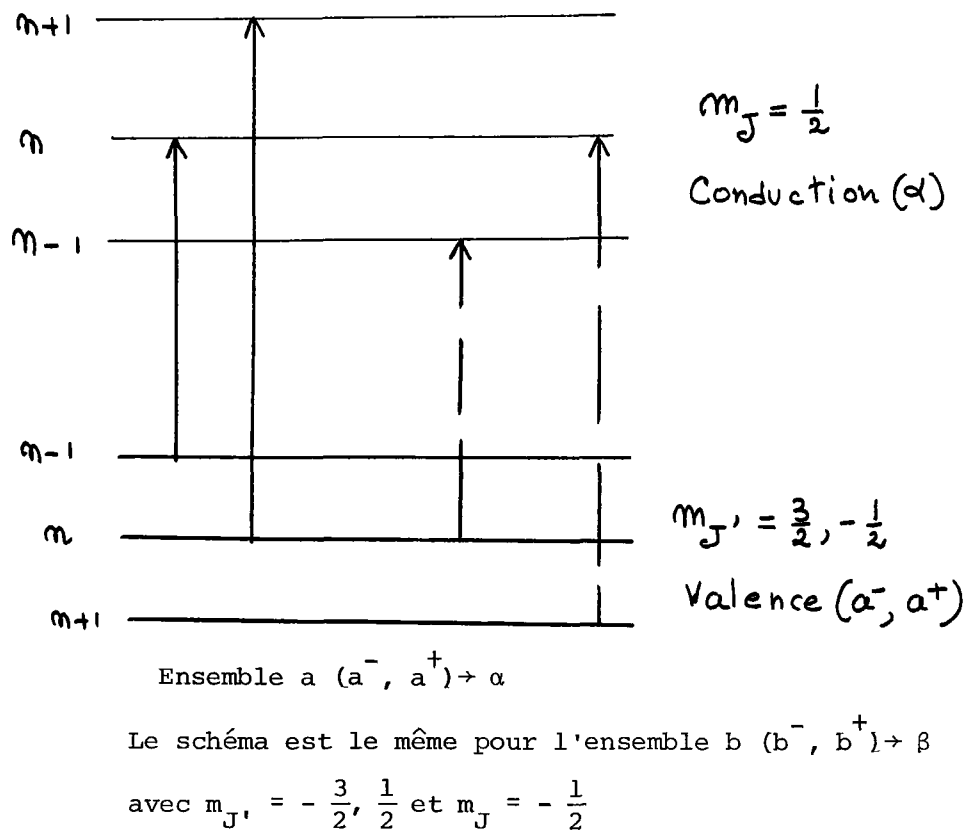


Figure 7

Règles de sélection pour les transitions entre niveaux de Landau de la bande de valence et la bande de conduction (Configuration de Faraday)

On peut finalement montrer [R59] que les transitions à partir des niveaux de trous lourds sont beaucoup plus intenses que celle issues des niveaux de trous légers. Les règles de sélection sont résumées sur la figure 7.

En utilisant ces résultats nous avons calculé les énergies de transition dans l'ensemble a pour un champ magnétique d'intensité et de direction variable pour InSb et GaSb à partir des énergies des niveaux obtenues dans la section V de ce chapitre.

B. Anisotropie des transitions interbandes

La figure 8 représente schématiquement l'absorption due à des transitions entre niveaux d'indices n ($n+1$) et $n-1$ (n) dans des monocristaux ayant leur direction $[111]$ et $[100]$ parallèle au champ magnétique. Cette figure montre que deux transitions identiques (par exemple $n \rightarrow n-1$) sont séparées d'une énergie ΔE si elles ont lieu dans des monocristaux d'orientation différente par rapport au champ magnétique. Les deux directions choisies pour la figure 8 sont celles qui donnent la plus grande valeur de ΔE . Les résultats numériques portant sur quelques transitions dans InSb et GaSb sont groupés dans le tableau I4. Dans la dernière colonne de ce tableau nous avons indiqué la précision expérimentale typique que l'on peut atteindre sur ces transitions et l'on voit que dans la plus part des cas cette précision permet de mesurer l'effet d'anisotropie des transitions.

L'étude des transitions interbandes permet donc d'étudier un monocristal de façon précise et en particulier de déterminer l'anisotropie des niveaux de Landau.

Il faut rappeler cependant, qu'expérimentalement la situation

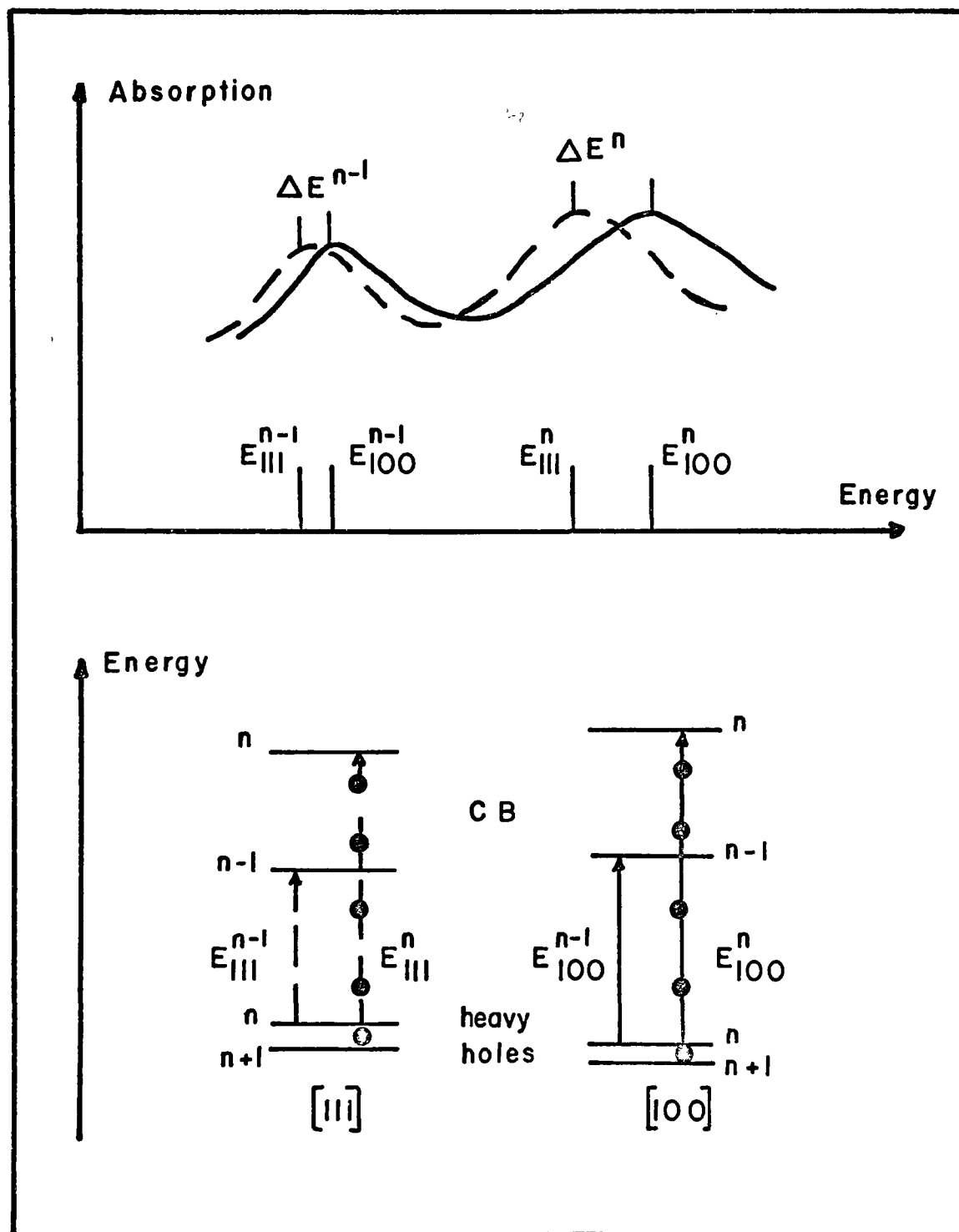


Figure 8

Représentation schématique de l'anisotropie des transitions entre niveaux de Landau.

TABLEAU I 4

Anisotropie des transitions interbandes

Matériau	Transition	$\Delta E = E_{[100]} - E_{[111]} \text{ (meV)}$			Précision (meV) Expérimentale
		3 Tesla	5 Tesla	7 Tesla	
InSb	H(2, 1)	0.7	1.2	1.8	0.5 à 0.7
	H(1, 2)	0.5	0.8	1.2	
	H(3, 2)	1.1	1.9	2.7	
	H(2, 3)	0.9	1.6	2.3	
	H(4, 3)	1.5	2.5	3.6	
GaSb	H(2, 1)	0.8	1.3	1.9	0.7 à 1.0
	H(1, 2)	0.5	0.7	1.1	
	H(3, 2)	1.2	2.0	2.8	
	H(2, 3)	0.8	1.5	2.1	
	H(4, 3)	1.4	2.7	3.8	

$$H(n, n') = \frac{[a^-(n) \rightarrow \alpha(n')] + [b^-(n) \rightarrow \beta(n')]}{2}$$

peut se compliquer. En effet une participation excitonique aux transitions a été observée dans de nombreux cas [Voir par exemple R76]. Il arrive que l'exciton associé à chaque niveau de Landau soit provoque un déplacement des structures observées, soit masque complètement la structure due à la transition interbande proprement dite.

L'importance de ces effets dépend essentiellement du matériau étudié. Le déplacement des structures excitoniques dans le champ magnétique a été étudié par plusieurs auteurs [E60, A73, AL74, C75]. Les travaux les plus récents montrent que ce déplacement est anisotrope et l'on ne peut utiliser directement les résultats publiés que si l'on étudie un monocristal orienté suivant les directions qui ont fait l'objet de ces calculs. Il serait donc nécessaire de généraliser ces théories pour une orientation quelconque du cristal dans le champ avant de les étendre aux polycristaux. Nous n'avons pas entrepris cette étude car nos résultats expérimentaux sur $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ montrent que la plus part des transitions observées ne sont pas influencées par les effets excitoniques. En fait, et nous le verrons plus loin, on peut très bien analyser les courbes d'absorption en ne tenant pas compte des premières structures proches du gap qui sont les seules dans lesquelles les excitons jouent éventuellement un rôle notable. Ceci est particulièrement vrai pour InSb [R76] et GaSb [F73].

Nous avons donc successivement montré que tout modèle satisfaisant pour les études de magnéto-optique dans des monocristaux devait tenir compte de l'anisotropie des niveaux de Landau et que l'étude des transitions entre niveaux de Landau était une bonne manière de mettre en évidence expérimentalement cette anisotropie. La question qui se pose maintenant est celle de savoir quelle méthode permet le mieux d'étudier des polycristaux. Par

méthode nous voulons dire à la fois méthode de calcul et méthode expérimentale. Pour cette dernière nous avons choisi la même que celle qui a fait ses preuves pour les monocristaux c'est à dire l'étude des transitions entre niveaux de Landau en utilisant l'effet photovoltaïque. Nous allons montrer que l'anisotropie des niveaux dans chaque cristallite formant le spécimen influe sur la forme de la courbe d'absorption observée. Il faut donc utiliser un modèle pour l'analyse, qui tienne compte de cette anisotropie. Ce modèle doit en outre permettre de déterminer F , P , γ_1 , γ_2 et γ_3 puisque tous ces paramètres sans exception sont nécessaires à une caractérisation minimum, satisfaisante du matériau étudié. Il apparaît donc que le modèle développé pour les monocristaux doit servir de base à l'étude de spécimens polycristallins. Il reste à trouver la meilleure manière de l'utiliser pour l'analyse de résultats expérimentaux. Nous avons investigué deux méthodes et nous expliquerons en fin de chapitre qu'elles sont équivalentes du point de vue de la précision. Le choix final est dicté par la plus grande efficacité de la méthode utilisée du point de vue économie de calcul.

VI. Application aux polycristaux

Il est utile de rappeler ici le but de notre travail. Nous voulons étudier la variation du schéma de bandes dans l'alliage $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ et pour cela nous voulons obtenir la variation des paramètres du modèle $\vec{k}, \vec{p}$. Les échantillons dont nous disposons étant polycristallins nous cherchons une méthode d'étude qui puisse relier les résultats expérimentaux à l'ensemble minimum de paramètres nécessaires à la description de l'alliage.

A- Elargissement des structures dans les expériences de magnéto-optique interbande sur des échantillons polycristallins.

Considérons un ensemble de microcristaux formant un échantillon

polycristallin. Dépendant de la méthode de fabrication et du matériau, ces cristallites seront orientées à l'intérieur d'un angle solide Ω plus ou moins grand. Plusieurs cas peuvent se présenter comme par exemple celui d'un échantillon formé de très petites cristallites orientées uniformément dans 4π ou celui d'un échantillon formé de quelques microcristaux de taille plus grande orientés dans un petit angle solide autour d'une direction fixe.

Dans tous les cas, si l'on met le spécimen dans un champ magnétique de direction fixe, les niveaux de Landau dans chaque cristallite auront une énergie qui dépendra de son orientation. Prenons le cas où les orientations des microcristaux sont distribuées de façon uniforme dans 4π . Sous l'effet d'un faisceau lumineux incident des transitions auront lieu dans chaque cristallite et, pour (n, n') fixé les énergies de cette transition dans toutes les cristallites varieront sur une bande ΔE comme celle de la figure 8 de la section précédente. L'expérimentateur observera un effet global et verra donc une structure élargie.

En outre, pour une orientation donnée, la séparation entre deux transitions consécutives n'est pas constante à cause de l'espacement non constant des niveaux (figure 3) et cette séparation varie de façon différente pour différentes orientations. Dans le spectre expérimental on a donc un espacement doublement variable qui, combiné à l'élargissement des structures réduit le nombre d'oscillations observables. Pour un matériau donné l'importance de ces effets est proportionnelle à l'angle solide Ω .

D'autres causes d'élargissement peuvent être envisagées comme par exemple la diminution du temps de relaxation τ des électrons ou des trous à cause de la diffusion aux interfaces des cristallites. Plus les cristallites sont petites plus cet effet devrait être important et il

devrait aussi apparaître dans d'autres expériences, même en l'absence de champ magnétique comme l'absorption piezo-modulée ou l'électrorélectivité par exemple. Un tel effet devrait aussi se manifester dans les alliages où l'on peut penser que la diffusion d'alliage due aux irrégularités à très petite échelle élargit les structures de transitions interbandes. Or de nombreuses expériences de ce type, sur des polycristaux et même sur des alliages polycristallins [B73, W64, AL72, M75] n'ont mis en évidence aucun élargissement notable des structures, comparées à celles observées dans les monocristaux. Si, en outre, la taille des cristallites composant nos spécimens est supérieure aux dimensions des orbites des électrons dans le champ magnétique, c'est à dire si la condition $\omega_c \tau > 1$ est satisfaite dans chaque microcristal, la diffusion ne peut pas être la cause principale de l'élargissement des oscillations dues aux transitions entre niveaux de Landau dans les polycristaux. Il semble donc au contraire que cet élargissement soit principalement dû à l'anisotropie des niveaux de Landau.

B- Analyse des transitions interbandes dans un polycristal

Comme dans tout modèle semi-empirique la détermination des paramètres se fait par comparaison des calculs théoriques avec les valeurs expérimentales. Dans l'étude des transitions interbandes on compare les énergies de transitions observées à celles calculées et l'on ajuste les paramètres du calcul pour que les valeurs calculées coïncident, à la précision expérimentale près, avec celles observées. Les paramètres de notre modèle sont E_0 , Δ_0 , F , P , γ_1 , γ_2 , γ_3 et ils caractérisent chacune des cristallites du spécimen polycristallin, quelque soit son orientation. Cette dernière est donnée par les angles θ et ϕ et intervient dans le calcul des énergies de transitions par l'intermédiaire des fonctions angulaires

(34). Si l'on néglige H_{1a}^{44} et H_{1b}^{44} la seule fonction utilisée est $f(\theta, \phi)$.

$$f(\theta, \phi) = \frac{3}{4} \sin^2 \theta [\cos^2 \theta (4 - \sin^2 2\phi) + \sin^2 2\phi] - 1$$

Pour un monocristal θ et ϕ sont fixes et $f(\theta, \phi)$ est donc connu.

Dans un polycristal les énergies de transition mesurées correspondent à des valeurs moyennes des énergies de transition de toutes les cristallites. Si celles-ci sont orientées uniformément dans un angle solide Ω , l'énergie moyenne pour chaque transition sera:

$$E_{\Omega} = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} E(\theta, \phi) d\Omega \quad (61)$$

Il faut donc calculer E_{Ω} pour les transitions observées et ajuster les paramètres indépendants de l'orientation pour faire converger les énergies calculées vers les énergies expérimentales. Cela suppose que l'on connaisse $E(\theta, \phi)$ pour θ et ϕ quelconque afin d'évaluer exactement l'intégrale (61). Malheureusement, on ne peut obtenir de valeur analytique exacte de $E(\theta, \phi)$ puisque les matrices d'interaction ne peuvent pas être diagonalisées analytiquement. Il faut donc utiliser une valeur approximative de E_{Ω} , mais l'approximation doit être telle que tous les paramètres indépendants de l'orientation soient déterminés par l'analyse numérique.

Dans une première méthode on peut choisir un tel ensemble de paramètres et diagonaliser numériquement les matrices d'interaction pour toute une série d'orientations couvrant uniformément Ω . Pour chaque transition on calcule ensuite la valeur moyenne numérique sur ces orientations et l'on compare ces valeurs moyennes aux valeurs expérimentales. En répétant le processus pour différents ensembles de paramètres on peut finalement obtenir celui qui minimise la déviation entre les valeurs

théoriques et expérimentales. Dans le cas limite où le nombre d'orientations utilisées dans le calcul tend vers l'infini, les énergies moyennes calculées tendent vers E_{Ω} défini par (61) et les paramètres obtenus alors sont les mêmes que ceux que l'on aurait obtenu en étudiant un monocristal. Pratiquement on ne peut inclure qu'un nombre fini de directions mais si ce nombre est assez grand, les énergies calculées sont très proches de E_{Ω} défini par (61), c'est la précision expérimentale qui permet de fixer le nombre de directions nécessaires. Les paramètres déterminés ainsi seront donc, à la précision expérimentale près, ceux du monocristal.

Dans une seconde méthode, on peut définir des matrices d'interaction moyennes $\bar{H}'^{44}(\Omega)$ en remplaçant dans H'^{44} les fonctions de θ et ϕ par leur valeur moyenne sur Ω . Une telle méthode, tout comme la précédente, permet de conserver à l'hamiltonien toutes ses caractéristiques, en particulier les paramètres d'anisotropie γ_2 et γ_3 . Par exemple, si Ω vaut 4π on obtient d'après (34)

$$\bar{f} = -\frac{2}{5} ; \quad \bar{g} = \frac{1}{10} ; \quad \bar{h} = 0 ; \quad \bar{\ell} = 0 ; \quad \bar{m} = \frac{5}{6} \quad (62)$$

ce qui donne pour $\gamma'_{\theta\phi}$ et $\gamma''_{\theta\phi}$ avec (34)

$$\bar{\gamma}' = \bar{\gamma}'' = \frac{2\gamma_2 + 3\gamma_3}{5} \quad (63)$$

Il suffit alors de diagonaliser les matrices d'interaction pour un ensemble de paramètres indépendants de l'orientation et de faire varier ces paramètres pour faire converger les énergies théoriques vers les valeurs expérimentales comme dans le cas d'un monocristal. Afin de tester ces deux méthodes nous avons étudié les transitions à partir des trous lourds dans InSb et GaSb. Les paramètres de bandes ont été pris dans la littérature [A72] et nous avons d'abord considéré le cas où Ω vaut 4π . Comme indiqué précédemment

nous négligeons $H'_{1a}{}^{44}$ et $H'_{1b}{}^{44}$. Dans la première méthode nous avons inclu jusqu'à 80 directions dans $[\theta = 0, \frac{\pi}{2}; \phi = 0, \frac{\pi}{4}]$ (intervalle suffisant pour $\Omega = 4\pi$ à cause de la périodicité de $f(\theta, \phi)$). Nous avons fait varier B de 1 à 7 teslas et avons calculé les énergies des 20 premières transitions. Le tableau I5 regroupe quelques résultats qui montrent que dans tous les cas la différence entre les énergies calculées par les deux méthodes est inférieure à 0.7 meV et toujours plus petite que la précision expérimentale. Si on inclus moins de directions dans le premier calcul la différence augmente; si on en ajoute elle reste à peu près constante. Autrement dit les valeurs calculées convergent vers la valeur théorique exacte. Les deux méthodes sont donc aussi précises l'une que l'autre pour InSb et GaSb si l'on utilise un assez grand nombre de directions dans la première. Le même type de comparaison pour un angle solide Ω plus petit aboutit à la même conclusion avec la seule différence que plus Ω est petit moins on a besoin d'inclure de directions dans la première méthode pour que les énergies convergent vers leurs valeurs réelles. Les paramètres indépendants de l'orientation déterminés par l'analyse de résultats expérimentaux par les deux approximations sont donc les mêmes et sont ceux qui caractérisent le semiconducteur étudié. La seconde méthode est beaucoup plus efficace en terme de temps de calcul à l'ordinateur et nous avons donc décidé de l'utiliser pour analyser les résultats expérimentaux sur $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$.

Nous avons donc finalement montré qu'un semiconducteur III-V pouvait être décrit à partir d'un nombre minimum de paramètres dans le cadre de la méthode $\vec{k} \cdot \vec{p}$. Ces paramètres permettent de décrire les interactions entre les bandes de valence, de conduction et "split-off" de façon exacte et les interactions entre ces bandes et les autres bandes de façon

TABLEAU I 5

Comparaison des énergies moyennes de transition

pour des microcristaux orientés uniformément dans $\Omega = 4\pi$.

Transition $a^-(n) \rightarrow \alpha^-(n')$	E_{Ω}^1 (meV) 1ère Méthode	E_{Ω}^2 (meV) 2ème Méthode	$\Delta E = E_{\Omega}^1 - E_{\Omega}^2$ (meV)	Précision exp ^{te}
In6b 3T				
5 $\rightarrow$ 4	320.59	320.50	.09	} $\approx .8$
5 $\rightarrow$ 6	348.65	348.55	.10	
10 $\rightarrow$ 9	390.12	389.94	.18	
10 $\rightarrow$ 11	412.27	412.08	.19	
20 $\rightarrow$ 19	497.46	497.12	.34	
20 $\rightarrow$ 21	514.29	513.94	.35	
7T				
20 $\rightarrow$ 19	703.83	703.18	.65	} ≈ 1.0
20 $\rightarrow$ 21	730.87	730.20	.67	
Ga6b 3T				
5 $\rightarrow$ 4	846.64	846.57	.07	} ≈ 1.0
5 $\rightarrow$ 6	860.33	860.25	.08	
10 $\rightarrow$ 9	884.11	883.94	.17	
10 $\rightarrow$ 11	896.76	896.58	.18	
20 $\rightarrow$ 19	951.96	951.67	.29	
20 $\rightarrow$ 21	963.04	962.74	.30	
7T				
20 $\rightarrow$ 19	1101.68	1101.07	.61	} ≈ 1.2
20 $\rightarrow$ 21	1121.70	1121.06	.64	

approximative satisfaisante en général. La magnéto-optique interbande appliquée à des monocristaux permet de déterminer expérimentalement ces paramètres. Les résultats obtenus sur des polycristaux font intervenir cet ensemble minimum de paramètres et doivent donc être analysés à l'aide d'un modèle n'en négligeant aucun. On ne peut obtenir un tel modèle qu'à partir de celui développé pour les monocristaux et c'est ce que nous avons fait en montrant qu'il existait une méthode simple d'analyse pour les polycristaux qui permettait d'obtenir tous les paramètres nécessaires.

Il reste maintenant à tester la valeur de la méthode dans un cas réel et utile pour le reste de notre travail. Nous le ferons avec InSb dans notre étude de l'alliage $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$. Avant de présenter ces résultats expérimentaux nous allons décrire la technique expérimentale et tout d'abord l'effet photovoltaïque que nous avons utilisé pour étudier les transitions interbandes.

C H A P I T R E I I

UTILISATION DE L'EFFET PHOTOVOLTAÏQUE ENSPECTROSCOPIE INTERBANDE

- I. Contact métal-semiconducteur
 - A- Etats de surface
 - B- Contact rectifiant, barrière de Schottky
- II. Variation spectrale du photovoltage
- III. Détermination des énergies de transition dans le semiconducteur
 - A- Champ magnétique nul
 - B- Champ magnétique non nul
 - C- Conclusion

A simple model for metal-semiconductor barriers is discussed in connection with the spectral variation of the photovoltage and the measurements of interband transition energies.

C H A P I T R E I I

UTILISATION DE L'EFFET PHOTOVOLTAÏQUE

EN SPECTROSCOPIE INTERBANDE

Nous ne voulons pas entreprendre ici une étude complète du problème présenté par l'origine des barrières métal-semiconducteur. Il s'agit simplement de résumer les éléments principaux permettant une compréhension suffisante du phénomène afin de pouvoir utiliser l'effet photovoltaïque pour l'étude des transitions interbandes.

I. Contact Métal-semiconducteurA- Etats de surface

Lorsqu'on étudie directement la réflectivité ou l'absorption d'un semiconducteur, les interactions les plus importantes entre la lumière incidente et le solide ont lieu près de la surface. A partir de ces études, on détermine par exemple le gap E_0 que l'on compare avec les valeurs théoriques. Or, ces calculs sont faits en supposant que le solide a une dimension infinie, autrement dit on néglige tous les effets de surface. Celle-ci crée pourtant une rupture brusque de la périodicité et du potentiel cristallin. De plus, dans un cristal réel, la surface est toujours imparfaite et ces imperfections influencent le potentiel dans une région proche de la surface. Il existe donc à la surface des états d'énergie qui lui sont propres et que l'on appelle états de surface. On peut montrer que ces états donnent naissance à une barrière de potentiel [S68]. En effet si on considère un semiconducteur de type n ayant les états de surface remplis jusqu'à une certaine énergie E , le niveau de Fermi de ces états doit s'aligner sur le niveau de Fermi à l'intérieur du cristal. Cet alignement s'effectue par la chute d'électrons de la bande de conduction ou de niveaux de donneurs dans des états de surface inoccupés. Comme le cristal dans son ensemble

doit rester neutre, le nombre de donneurs ionisés par cm^2 dans une couche d'épaisseur x_0 doit être égal à l'excès d'électrons des états de surface. En écrivant la condition d'équilibre on montre qu'il existe alors une barrière eV_0 telle qu'indiquée sur la figure 9.

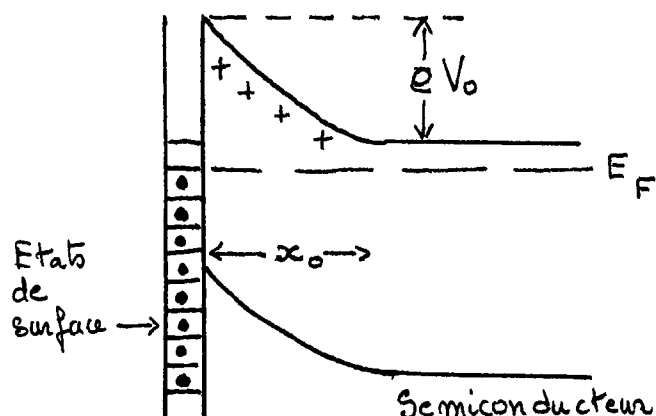


Figure 9

Formation d'états de surface sur un semiconducteur

L'origine de la barrière de Schottky dépend du semiconducteur comme le montre le modèle simplifié que nous allons décrire et il semble [voir par exemple L78] que dans les composés III-V elle soit due aux états de surface qui peuvent ou non être modifiés par la présence du métal déposé sur le semiconducteur. La situation est donc analogue lorsqu'on étudie l'absorption (ou la réflectivité), et l'effet photovoltaïque. Le gap mesuré dans les deux cas devrait donc être le même. En fait les paramètres obtenus dans des expériences de magneto-optique par réflectivité, absorption ou effet photovoltaïque sont semblables [R76, P66, P67; A72].

B- Contact rectifiant, Barrière de Schottky

Lorsqu'on met en contact intime un métal et un semiconducteur l'équilibre thermodynamique doit s'établir et les niveaux de Fermi des

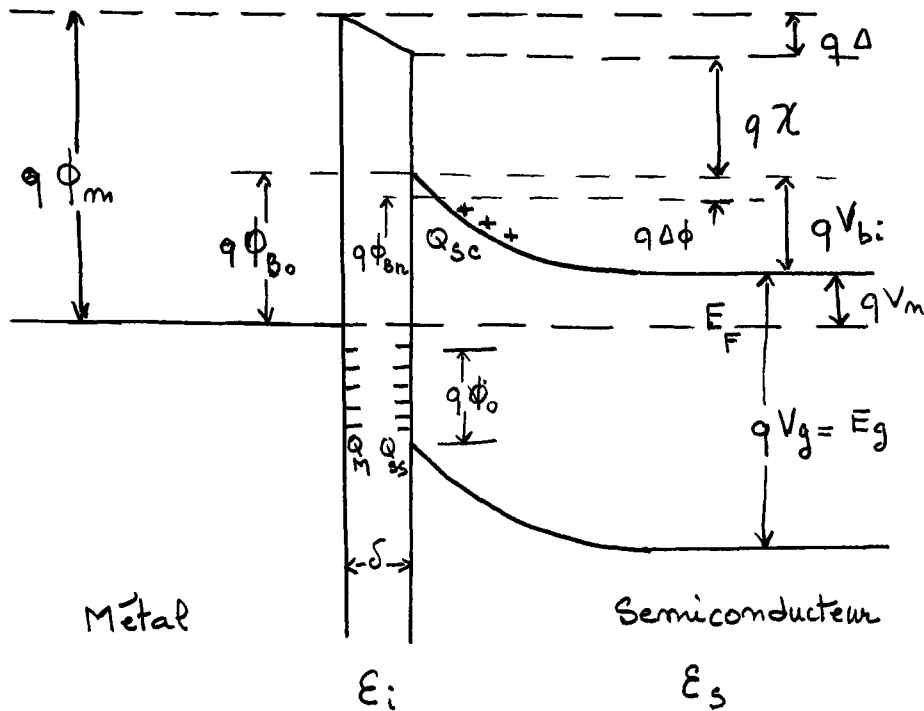


Figure 10

Barrière métal-semiconducteur [S69]

ϕ_m : Potentiel d'extraction.

ϕ_{Bn} : Hauteur de barrière.

ϕ_{B0} : Valeur asymptotique de ϕ_{Bn} à champ électrique nul.

ϕ_0 : Niveau d'énergie à la surface.

$\Delta\phi$: Abaissement de barrière dû à la force d'image.

χ : Affinité électronique du semiconducteur.

V_{Bi} : Potentiel intérieur.

ϵ_s : Permittivité du semiconducteur.

ϵ_i : Permittivité de la couche interfaciale.

δ : Epaisseur de la couche interfaciale.

Q_{sc} : Densité de charges d'espace dans le semiconducteur.

Q_{ss} : Densité d'états de surface du semiconducteur.

Q_M : Densité d'états de surface du métal.

deux matériaux doivent s'aligner. Dépendant du potentiel d'extraction du métal, de l'affinité électronique du semiconducteur et de la densité d'états de surface, une barrière se crée ou non entre les deux matériaux.

La figure 10 représente un contact métal-semiconducteur rectifiant pour lequel on fait essentiellement deux hypothèses [S69].

- i) La couche interfaciale d'épaisseur δ est de dimension atomique, transparente aux électrons et peut supporter une différence de potentiel.
- ii) Le nombre d'états de surface, par unité de surface et par eV, sur le semiconducteur ne dépend que de la surface de celui-ci.

Notons que cette seconde hypothèse n'est pas toujours vérifiée dans la réalité [L78, LE78].

En utilisant les notations de la figure 10, et si l'on suppose en outre que N_D , la concentration en donneurs n'est pas trop élevée ($N_D < 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, avec $\epsilon_s \approx 10 \epsilon_0$ et $\epsilon_i \approx \epsilon_0$) on peut calculer la hauteur de barrière et l'on obtient la relation approximative suivante:

$$\phi_{Bn} \approx C_2 (\phi_m - \chi) + (1 - C_2) \left(\frac{E_g}{q} - \phi_0 \right) - \Delta\phi \quad (1)$$

$$\text{avec } C_2 = \frac{\epsilon_i}{\epsilon_i + q^2 \delta D_s} \quad (2)$$

Deux cas limite peuvent se produire

- i) $D_s \rightarrow \infty$, très grande densité d'états de surface,

$$q \phi_{Bn} = (E_g - q \phi_0) - q \Delta\phi \quad (3)$$

la hauteur de barrière dépend uniquement du dopage et des propriétés de surface du semiconducteur.

- ii) $D_s \rightarrow 0$, très peu d'états de surface,

$$q \phi_{Bn} = q (\phi_m - \chi) - q \Delta\phi \quad (4)$$

la barrière est une barrière de Schottky idéale. Ces deux cas limite

peuvent réellement se produire pour différents types de semiconducteurs. Expérimentalement, Mead et Spitzer [M64] ont montré que pour les contacts Or-Semiconducteur III-V on obtenait des barrières de l'ordre de $\frac{2}{3} E_g$.

Ce modèle simple est assez approximatif, mais il permet néanmoins de comprendre le phénomène dans son ensemble et s'avère suffisant pour l'emploi que nous faisons des barrières métal-semiconducteur. Nous allons maintenant rappeler la relation entre le photovoltage et les propriétés optiques qui a été établie par plusieurs auteurs.

II. Variation spectrale du photovoltage

Considérons une cellule photovoltaïque de type sandwich (Au-Semiconducteur-In par exemple). Si l'on éclaire la barrière métal-semiconducteur avec des photons d'énergie égale ou supérieure à la largeur de bande interdite (gap) et si la couche métallique formant la barrière est transparente à cette énergie, des électrons du semiconducteur sont excités à travers le gap dans une région proche de la surface. La barrière de potentiel crée un champ électrique dans cette région et les paires électrons-trous sont accélérées créant ainsi un courant. Si on mesure la différence de potentiel (photovoltage) entre le métal et l'arrière de la cellule on observe un signal qui varie avec l'énergie des photons incidents.

La relation entre le photovoltage V_{pv} et le coefficient d'absorption du semiconducteur a été établie par Gartner [G54] et reprise par d'autres [N75, R76]. On montre que si l'intensité du faisceau d'énergie $h\nu$ est I , si le rendement quantique du semiconducteur est η , le photovoltage varie en fonction du coefficient d'absorption α du semiconducteur suivant la relation

$$V_{pv} \approx \frac{kT}{J_s} \phi \left(1 - \frac{e^{-\alpha W}}{1 + \alpha L_p} \right) \quad (5)$$

où l'on a posé $\phi = I\eta$, W est la longueur de la zone d'épuisement, L_p la longueur de diffusion des porteurs minoritaires et J_s est la densité de courant de saturation en polarisation inverse. On a supposé en outre que l'intensité I est faible [N75], et l'on néglige tous les effets de réflexion à la surface. La relation (5) montre donc que le photovoltage varie en fonction de α . La variation de V_{PV} avec la température est plus complexe qu'il n'y paraît à première vue (J_s par exemple dépend de la température) et cette variation a été étudiée pour une cellule Au-InSb-In [R77]. Les auteurs ont montré que le photovoltage augmente lorsque la température décroît. L'augmentation peut être assez forte ($\times 10^3 - 10^4$) entre 300 K et 6 K. Nous avons observé des augmentations du même ordre de grandeur dans toutes les cellules étudiées au cours de ce travail.

Il reste maintenant à étudier de plus près la relation (5) afin de pouvoir déterminer à partir des variations de V_{PV} l'énergie des transitions interbandes.

III. Détermination des énergies de transition dans le semiconducteur

On sait que le coefficient d'absorption varie rapidement au voisinage des transitions interbandes. La forme de la variation dépend de nombreux facteurs [B66]. Nous allons maintenant regarder de plus près la variation de V_{PV} au voisinage des énergies de transitions dans les deux cas expérimentaux que nous nous attendons à rencontrer, c'est à dire au voisinage d'un gap direct E_g d'un semiconducteur non perturbé par un champ magnétique et au voisinage des transitions entre niveaux de Landau associés à ce gap direct lorsqu'on plonge le semiconducteur dans un champ quantifiant. Une étude semblable pourrait être faite dans d'autres cas en utilisant un coefficient d'absorption α approprié.

A- Champ magnétique nul

Le coefficient d'absorption $\alpha(0)$ peut s'écrire [voir par exemple B59].

$$\alpha_0(0) = \frac{A}{h\nu} (h\nu - E_g)^{\frac{1}{2}} \quad (6)$$

si l'on néglige tout élargissement. On peut introduire un élargissement δ de type Lorentzien en ajoutant un facteur $i\delta$ à E_g et en prenant la partie réelle du coefficient α ainsi obtenu, ce qui donne:

$$\alpha_E(0) = A_E \frac{\{[(h\nu - E_g)^2 + \delta^2]^{\frac{1}{2}} + (h\nu - E_g)\}^{\frac{1}{2}}}{h\nu} \quad (7)$$

Si l'on remplace α dans la relation (5) par $\alpha_0(0)$ ou $\alpha_E(0)$ on peut, pour toute valeur de δ , W et L_p , calculer V_{PV} pour $h\nu$ variant autour de E_g et étudier l'influence de chaque paramètre sur le photovoltage. Nous présentons ici quelques résultats d'une étude systématique. Les courbes théoriques de α et V_{PV} représentées sur les figures 11 et 12 ont été calculées avec les paramètres suivants:

$$\delta = 1 \text{ meV} \quad W = 1 \mu\text{m}$$

$$\delta = 5 \text{ meV} \quad W = 0.2 \mu\text{m}$$

$$L_p = \frac{W}{10}, \quad W, 10 \text{ W}$$

$$E_g = 235 \text{ meV (InSb)}$$

On sait que l'élargissement δ pour InSb est faible à basse température [J67] et les valeurs choisies couvrent amplement les possibilités réelles.

On peut estimer W en prenant l'approximation de jonction brusque [S69]

$$W' = \left[\frac{2\varepsilon_s}{q N_D} \left(V_{Bn} - \frac{kT}{q} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (8)$$

et des valeurs typiques de ε_s , N_D et V_{Bn} .

$$\varepsilon_s = 16\varepsilon_0$$

$$N_D \approx 10^{16} \text{ cm}^{-3}$$

$$V_{Bn} = \frac{2}{3} \times 0.235 \text{ eV}$$

$$T = 6 \text{ K}$$

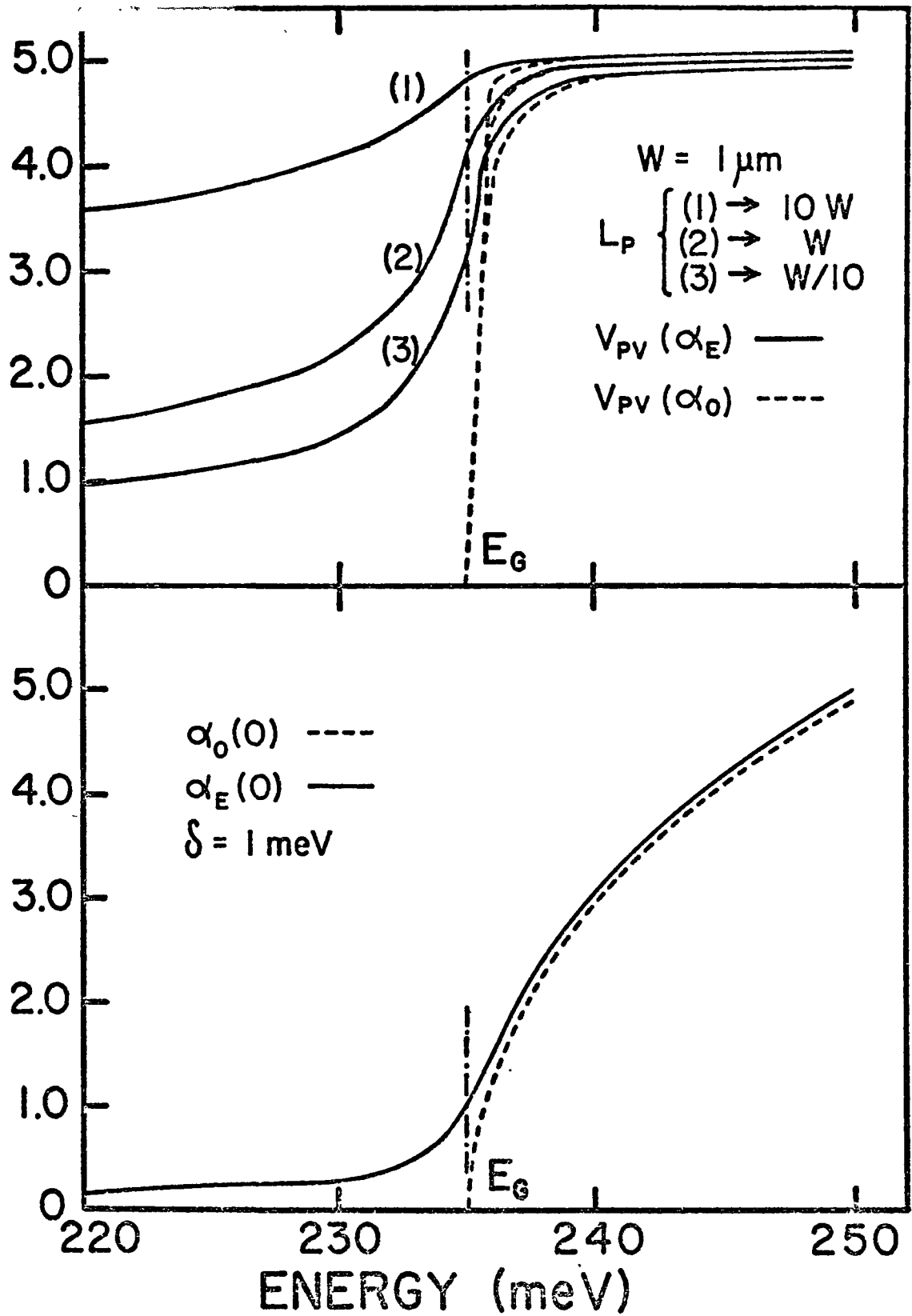


Figure 11

Variation spectrale à $B = 0$ de l'absorption (α) et du photovoltage (V_{PV}) calculées pour diverses valeurs du paramètre L_P avec $W = 1 \mu m$ et $\delta = 1 \text{ meV}$ (éq. 5,6 et 7)

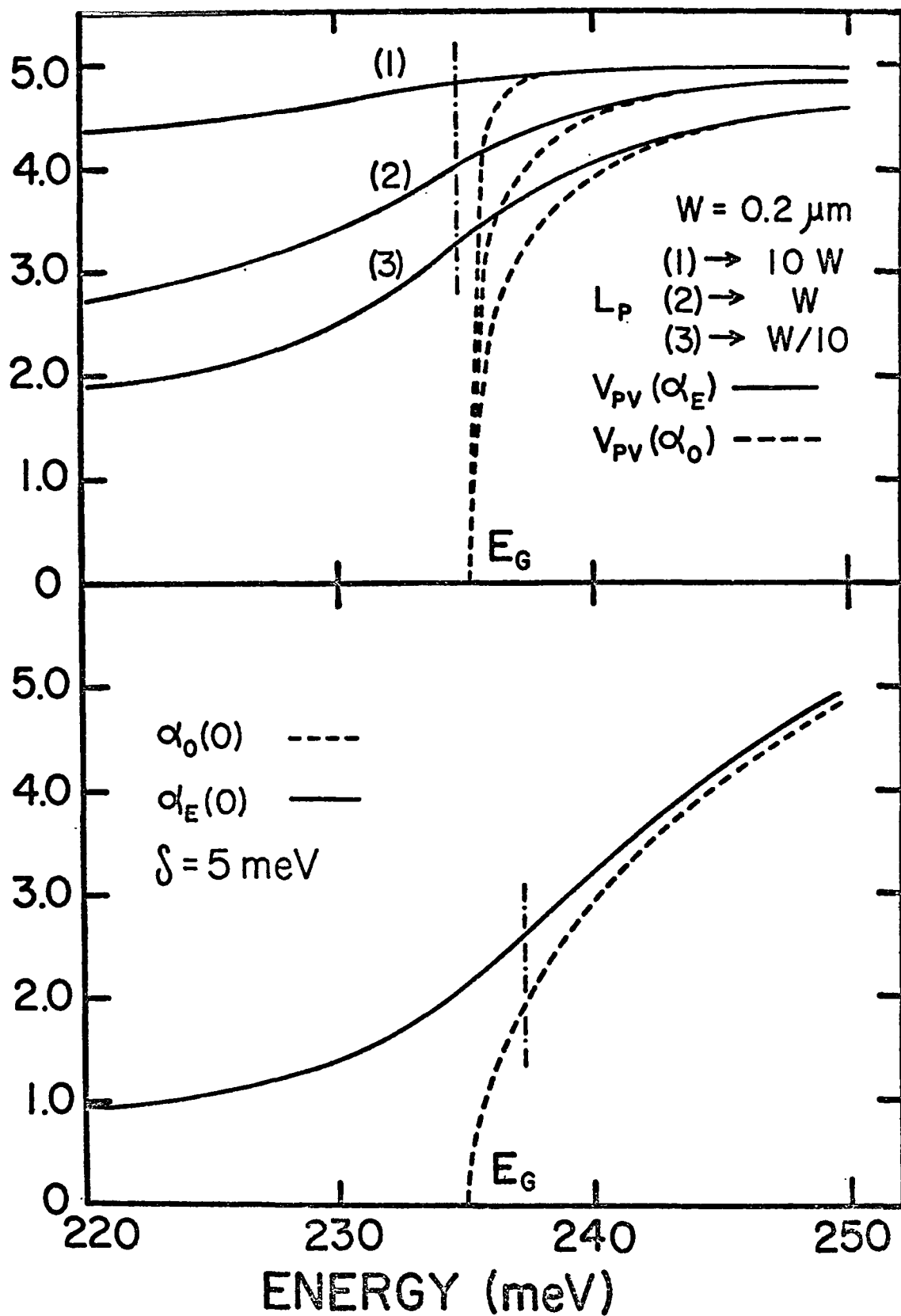


Figure 12

Variation spectrale à $B=0$ de l'absorption (α) et du photovoltage (V_{pv}) calculées pour diverses valeurs du paramètre L_p avec $W=0.2 \text{ m}$ et $\delta = 5\text{meV}$ (équ. 5, 6 et 7)

On obtient $W \approx 0.2\mu\text{m}$. Les valeurs de L_p sont ajustées en fonction de W et varient donc de $0.02\mu\text{m}$ à $10\mu\text{m}$ ce qui couvre les valeurs habituelles de L_p dans InSb [S68, W78]. Sur les figures 11 et 12 les courbes en trait plein sont celles correspondant à δ non nul, celles en pointillés correspondant à $\delta = 0$. On peut voir que la variation du photovoltage au voisinage de $h\nu = E_g$ est d'autant plus importante que L_p est petit devant W . Une étude systématique de L_p et W montre que pour L_p petit on obtient une variation maximale de V_{PV} lorsque la relation suivante est satisfaite:

$$0.1 \leq \alpha W \leq 1 \quad (9)$$

Le point sur lequel nous voulons insister plus particulièrement est le suivant: la transition ($h\nu = E_g$) a lieu au point correspondant au maximum de pente de V_{PV} seulement si $\delta = 0$. Le maximum de pente est indiqué par un trait vertical sur chacune des courbes. On peut montrer analytiquement à partir des relations 5 et 7 que le déplacement du maximum de pente par rapport à E_g est proportionnel à δ . Lorsque δ est faible ($\delta = 1 \text{ meV}$) le déplacement est nettement inférieur à 1 meV pour le cas étudié ici (InSb) et donc, expérimentalement, le maximum de pente correspond à l'énergie de transition puisque le déplacement est inférieur à la précision donnée par le système optique. Par contre, si δ augmente trop (si la température augmente par exemple) on ne peut plus mesurer l'énergie de transition précisément sans faire une étude de forme de la courbe. Notons que le problème est le même pour les mesures d'absorption directe comme on le voit sur les courbes de α_E où aucune structure particulière ne vient marquer la transition $h\nu = E_g$.

Evidemment, les effets excitoniques négligés ici compliquent éventuellement la forme de la courbe.

B- Champ magnétique non nul

Il s'agit ici de déterminer les énergies de transitions interbandes entre niveaux de Landau. En présence d'un champ magnétique le coefficient d'absorption peut s'écrire de la façon suivante pour des transitions associées à un gap direct:

$$\alpha_E(B) = \frac{AE_c}{2E_{ph}} \sqrt{\hbar\tau} \sum_n \left\{ \frac{[(E_{ph} - E_n)^2 \tau^2 + \hbar^2]^{\frac{1}{2}} + (E_{ph} - E_n) \tau}{2 [(E_{ph} - E_n)^2 \tau^2 + \hbar^2]} \right\}^{\frac{1}{2}} \quad (10)$$

où

$$E_c = \frac{\hbar e^2}{m_o c} \left(\frac{1}{m_c} + \frac{1}{m_{hh}} \right)$$

$$\frac{\hbar}{\tau} = \delta$$

et E_{ph} représente l'énergie du photon incident. E_n représente la n-ième énergie de transition. Nous ne considérons ici pour simplifier que les transitions à partir des niveaux de trous lourds. Nous avons calculé $V_{PV}(\alpha_E)$ en utilisant les relations (5) et (10) avec pour E_n les valeurs obtenues pour InSb par diagonalisation numérique de H_{oa}^{44} et H_{ob}^{44} . Les courbes de la figure 13 représentent α_E et V_{PV} calculés avec $\delta = 5$ meV, $W = 0.5\mu m$, $B = 3T$ et 3 valeurs de L_p indiquées sur cette figure.

Comme pour les transitions à champ magnétique nul les variations du photovoltage sont plus nettes lorsque L_p est inférieur à W . On remarque aussi que le maximum de pente pour chaque oscillation correspond assez bien à l'énergie de transition. Dans le cas présenté ici la plus grande différence d'énergie entre la transition et le maximum de pente est 2 meV. Pour toutes les transitions d'indice $n \geq 2$ cette différence est nettement inférieure à 1 meV. Nous verrons dans la présentation des résultats que seule ces transitions sont utilisées dans l'analyse, les premières pouvant être influencées par les excitons. Il faut noter qu'en aucun cas (sauf si $\delta = 0$) l'énergie de transition ne correspond au maximum des oscillations, par contre plus δ est petit plus le maximum de pente est proche de l'énergie

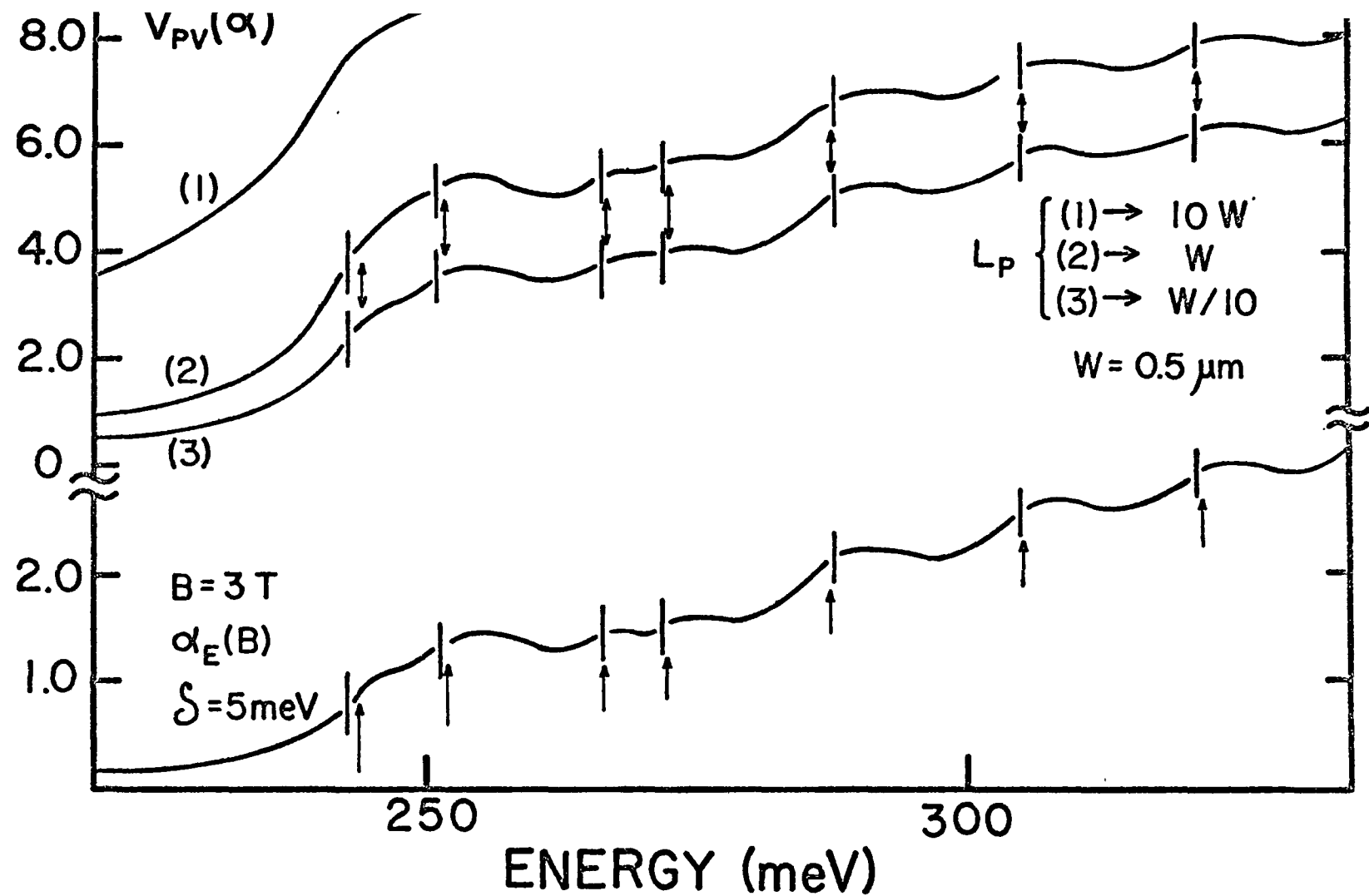


Figure 13

Variation spectrale à $B = 3\text{ T}$ de l'absorption α et du photovoltage V_{PV} calculée pour diverses valeurs de L_P avec $W = 0.5\text{ }\mu\text{m}$ et $\sigma = 5\text{ meV}$. (équations 5 et 10). ($\uparrow$) : Energie de transition ($|$) : Maximum de pente.

de transition et évidemment plus celle-ci est proche du maximum de l'oscillation.

Dans toutes nos mesures nous choisirons donc comme énergies de transition le maximum de pente précédant chaque structure ce qui limitera la précision pour les raisons indiquées ci-dessus. Cette précision est cependant comparable à celle que l'on obtient dans d'autres méthodes comme l'absorption ou la réflectivité. Une analyse de forme des courbes donnerait une meilleure précision mais ne serait possible que si l'on pouvait calculer l'intensité des transitions.

C- Conclusion

Nous avons montré dans ce chapitre que l'effet photovoltaïque pouvait être utilisé pour déterminer les énergies de transitions interbandes dans un semiconducteur perturbé par un champ magnétique (ou non perturbé). L'élargissement des structures associées aux transitions est faible à basse température et les énergies peuvent être déterminées avec une précision nettement suffisante pour observer les effets d'anisotropie mis en évidence au chapitre précédent (voir tableau I 4') dans les monocristaux. Ceci a d'ailleurs été montré expérimentalement par Paul Rochon [R76] dans Ge, InP, InSb et GaAs. Pour ce qui concerne les polycristaux, les structures sont plus larges si les cristallites sont orientées dans un angle solide Ω assez grand. Le maximum de pente et l'énergie moyenne de transition sur Ω (équation 61 chapitre I) peuvent être encore confondus sans pour cela diminuer notablement la précision. Nous l'avons établi en calculant les courbes analogues à celles de la figure 13 pour un polycristal composé de cristallites orientées uniformément dans 4π ce qui représente le cas le plus défavorable. Les résultats expérimentaux sur InSb polycristallin

présentés plus loin nous ont permis d'obtenir des paramètres de bandes satisfaisants en déterminant les énergies de transition de cette façon, ces paramètres étant en bon accord avec ceux obtenus sur des monocristaux [Voir A72]. Avant de présenter ces résultats nous allons décrire l'équipement utilisé et la technique instrumentale.

C H A P I T R E III

MATERIAUX, INSTRUMENTATION ET EXPERIENCES

- I. Préparation des échantillons
 - A- Caractérisation des spécimens
 - B- Préparation des cellules photovoltaïques
- II. Système Optique
- III. Traitement et enregistrement des spectres
- IV. Cryostats et bobines supraconductrices
 - A- Description des cryostats
 - B- Alimentation des bobines supraconductrices
- V. Procédure Expérimentale
 - A- Refroidissement
 - B- Mesures

The experimental procedure is described including sample characterization and photovoltaic cell preparation. The method of measurement using a spectrometer, liquid helium cryostats and superconducting coils is briefly reviewed.

C H A P I T R E I I I

MATERIAUX, INSTRUMENTATION ET EXPERIENCES

Les échantillons de $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ utilisés dans notre travail nous ont été fournis par le Pr. J.C. Woolley et par le Dr. A. Joullié (Université Montpellier). Nous n'entrerons pas dans la description des méthodes de croissances de ces matériaux que l'on peut trouver dans les Références [C69 et J75]. D'autres renseignements sur la croissance des alliages III-V peuvent être trouvés par exemple dans la référence [G78]. Un bref résumé sur ce sujet est donné dans l'Annexe D à la fin de ce travail.

Nous décrirons dans ce chapitre la préparation des cellules photovoltaïques et la méthode expérimentale qui nous a permis d'obtenir la variation spectrale du photovoltage à basse température en présence d'un champ magnétique.

I. Préparation des échantillonsA- Caractérisation des spécimens

Avant de préparer les cellules photovoltaïques, il faut déterminer la composition de chaque échantillon ainsi que la taille et l'orientation des cristallites qui les composent. Des spécimens polycristallins de quinze compositions différentes ont été étudiés. La composition des échantillons fournis par le Pr. J.C. Woolley a été mesurée en utilisant la diffraction des rayons X et en appliquant la loi de Vegard qui est valide pour $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ [C69, J72]. Nous avons vérifié par la même méthode la composition des spécimens du Dr. A. Joullié qui avaient été étudiés au paravant à la microsonde électronique [J75]. Les compositions qui varient de $x = 0$ à $x = 0.92$ sont ainsi déterminées avec une précision $\approx 1\%$. Tous les échantillons sont composés d'une seule phase. Les échantillons ayant un pourcentage de GaSb ≤ 0.62 sont de type n, les autres sont de type p; la

concentration en porteurs est de l'ordre de 10^{15} à 10^{16} cm^{-3} à 300 K [C69,J75]. Tous les échantillons sont polycristallins mais la taille des cristallites varie de l'un à l'autre. Nous avons estimé les dimensions et l'orientation des microcristaux de la façon suivante. Chaque échantillon, une fois coupé, poli et décapé comme indiqué plus loin, est installé en face d'un faisceau de rayons X de façon telle que les rayons frappant le cristal soient réfléchis sur un film photographique. Cette méthode (réflexion de Laue) est couramment employée pour déterminer l'orientation des monocristaux [W63]. Le faisceau de rayons X a une section $\approx .5 \text{ mm}^2$ et la photographie reflète donc les caractéristiques cristallographiques d'une portion de surface du semiconducteur du même ordre de grandeur. Si l'échantillon est monocristallin l'image est formée d'un certain nombre de points nettement définis correspondant aux réflexions des divers plans d'atomes du cristal. Cette image présente donc les caractères de symétrie du matériau étudié et l'analyse de cette symétrie permet de déterminer l'orientation de la surface qui reçoit les rayons X. Si l'échantillon est polycristallin, l'image peut avoir différents aspects suivant la taille et l'orientation respective des cristallites. Si le faisceau frappe un seul microcristal l'image est la même que celle d'un monocristal. Sinon on observe des points plus gros, moins nets et l'image peut alors n'avoir aucune symétrie particulière. On peut donc prendre de telles photographies en plusieurs endroits de la surface de l'échantillon et estimer ainsi les dimensions en surface des cristallites ainsi que leur orientation. Le nombre d'échantillons de bonne qualité à notre disposition étant limité nous n'avons pas pu en général choisir des spécimens formés de grosses cristallites. Douze des quinze

échantillons sélectionnés sont formés de microcristaux dont les dimensions linéaires à la surface ont été estimées être ≤ 0.1 mm avec des orientations se répartissant dans un angle solide de 4π . Les trois autres sont formés de plus grosses cristallites ($> 1\text{mm}$) orientées autour d'une direction définie, dans un petit angle solide. Leur orientation est donnée par $\theta \approx 45^\circ$, $\phi \approx 68^\circ 35$ ($x=0.38$) et $\theta \approx 28^\circ 45$, $\phi \approx 0^\circ$ ($x=0.905$ et $x=0.92$). L'angle solide est calculé avec $\Delta\theta = \Delta\phi = \pm 5^\circ$ et les angles polaires θ et ϕ sont mesurés à partir de $[001]$ et $[100]$.

B- Préparation des cellules photovoltaïques

Chaque spécimen est découpé pour lui donner une forme parallélépipédique de dimension typique $5 \times 3 \times 1\text{mm}^3$. Les deux plus grandes faces sont ensuite polies mécaniquement à la poudre d'alumine ($5\mu\text{m}$ à $0.05\mu\text{m}$) jusqu'à obtention de faces miroirs. Le spécimen est ensuite décapé dans un mélange méthanol-brome (5% de brome) qui décape de façon à peu près identique InSb et GaSb [M72]. Une couche mince ($1000 - 1500 \text{ \AA}$) d'indium est déposée par évaporation sous vide sur la face arrière du spécimen et couvre 80 à 90% de celle-ci. Un bon contact ohmique est assuré en chauffant l'ensemble semiconducteur - indium sous atmosphère d'azote à 300°C pendant quelques secondes durant lesquelles l'indium diffuse vers l'intérieur du semiconducteur. Le spécimen est ensuite placé sur un morceau de plaquette circulaire ($\phi \approx 1.5\text{cm}$) pour circuits intégrés sur laquelle on a préparé 6 contacts afin d'installer 3 échantillons [figure 14]. La connection arrière entre l'indium et le cuivre de la plaquette est faite à la peinture d'argent. Trois spécimens sont installés sur une plaquette et recouverts d'un cache en feuille d'aluminium comportant trois ouvertures, une pour chaque échantillon. La plaquette est installée dans un évaporateur pour déposer

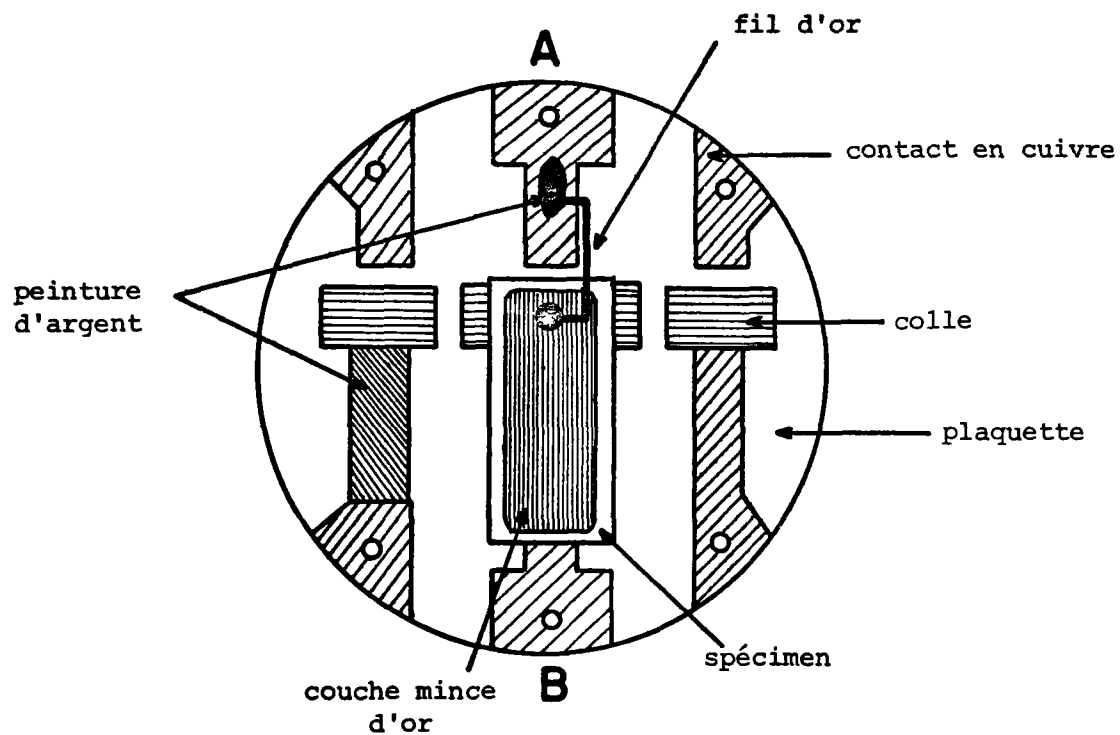


Figure 14

Plaquette pour cellules photovoltaïques

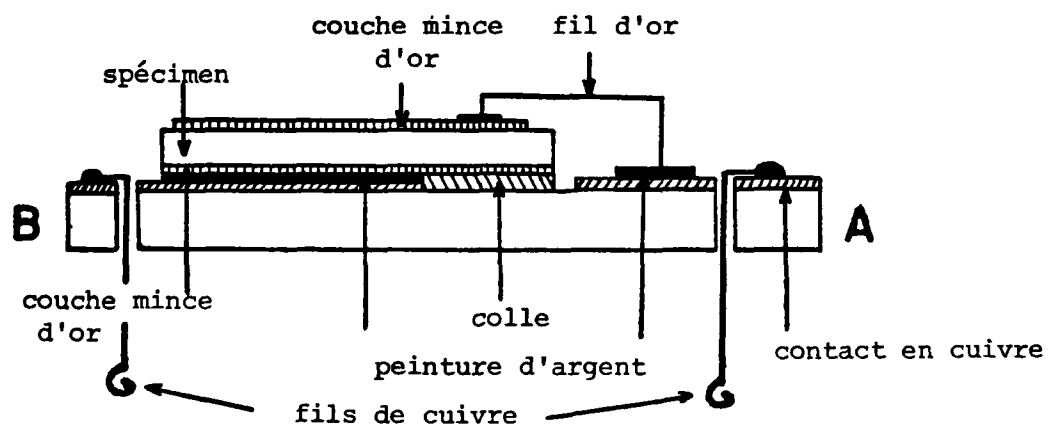


Figure 15

Coupe d'une cellule photovoltaïque sandwich

une couche mince d'or (100 - 500 Å), formant une barrière de Schottky avec le semiconducteur, et couvrant 80 à 90% de la face avant des échantillons. Un fil d'or ou de platine ($\phi = \frac{5}{100}$ mm) joint la couche d'or à un contact de la plaquette [figure 15]. A chacun des 6 contacts de la plaquette est soudé à un fil de cuivre (# 28). Les 6 fils seront ensuite soudés à 6 connections du porte-échantillon lors du montage dans le cryostat.

L'étude de la réponse spectrale des cellules photovoltaïques ainsi réalisées nécessite l'utilisation d'un système optique, d'un système de traitement et d'enregistrement des signaux et d'un cryostat contenant une bobine supraconductrice. Nous allons maintenant décrire le dispositif expérimental en utilisant les notations de la figure 16.

II. Système optique

La région spectrale à couvrir dans l'étude des transitions entre niveaux de Landau à des énergies proches du gap dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ s'étend à peu près de 1 μm à 5 μm . Nous avons utilisé un spectromètre (SP) à réseau plan, de type Czerny-Turner (Spex 1700-111) avec des réseaux (R) blazés respectivement à 1.6 μm et 4 μm . La source lumineuse (SO) donnant le maximum d'intensité entre 1 μm et 2 μm est une lampe quartz-iode, au delà de 2 μm nous avons utilisé un filament de Nernst. La lumière monochromatique sortant du spectromètre est réfléchiée par un miroir semi-transparent (SM) puis focalisée avec un miroir concave sur l'échantillon (S) situé dans le cryostat (C). La résolution spectrale du système dépend du réseau utilisé et de la largeur des fentes d'entrée et de sortie du spectromètre. Les oscillations apparaissant dans les spectres de transitions entre niveaux de Landau étant relativement larges il est inutile d'employer des fentes trop étroites pour obtenir une résolution qui ne présente aucun

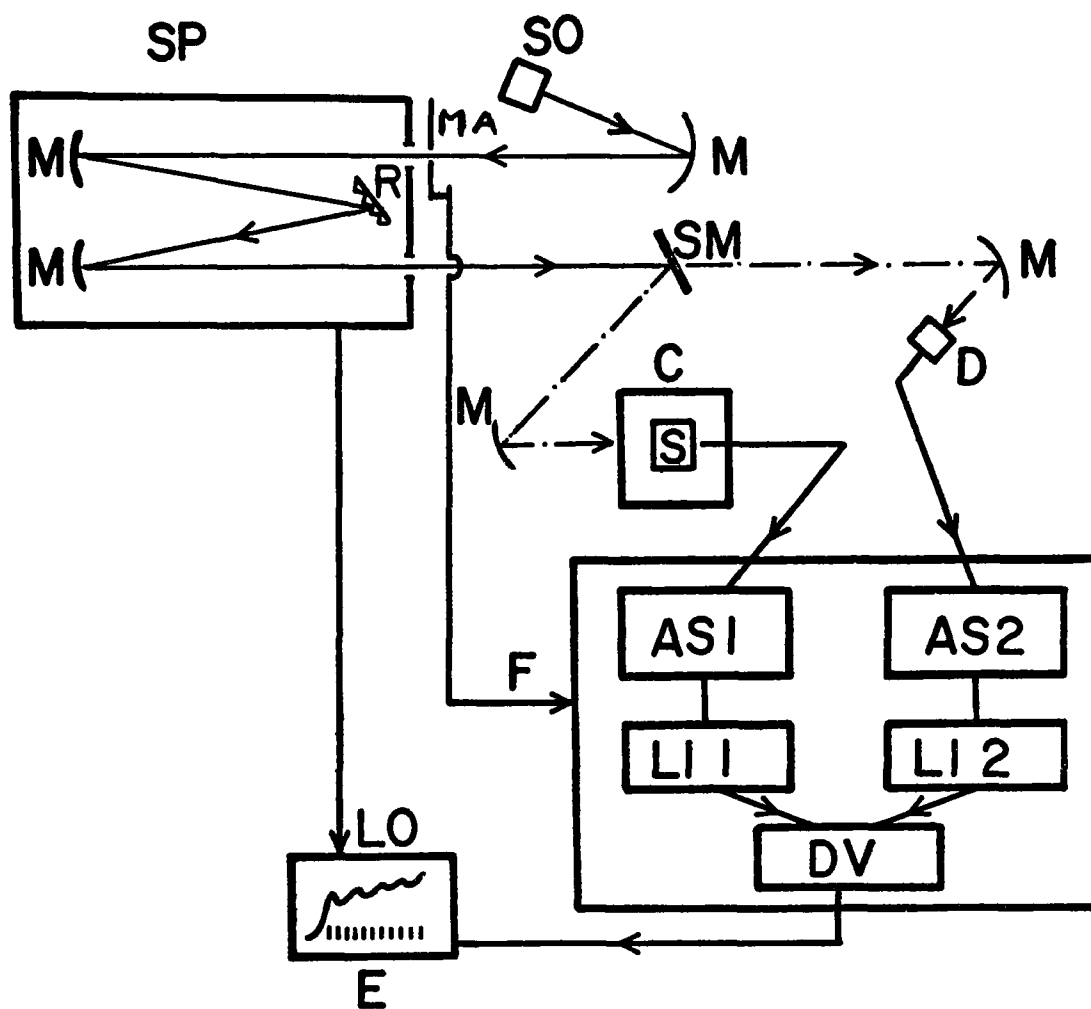


Figure 16

Schéma synoptique du système expérimental (description dans le texte)

avantage. En outre, il est nécessaire d'avoir une intensité lumineuse la plus grande possible sur l'échantillon pour pouvoir limiter au maximum l'amplification électronique du signal photovoltaïque. En général, des fentes de 1mm de largeur donnent un excellent compromis entre la résolution (10 à 20 Å) et l'intensité lumineuse. Des filtres multidiélectriques peuvent être adaptés à la sortie du spectromètre pour éliminer les ordres supérieurs.

Enfin, le miroir semi-transparent (SM) placé dans le trajet du faisceau lumineux laisse passer une partie de la lumière recueillie sur un détecteur pyroélectrique (D). Ce système à double faisceau permet d'éliminer du spectre enregistré les variations d'intensité de la lumière incidente. Ces variations sont dues à la source elle-même (variation spectrale de l'émission), induites par le réseau (effet du blaze) ou causées par les bandes d'absorption de la vapeur d'eau ou du CO₂ présents dans l'air. L'efficacité du système de division est illustrée sur la figure 17 qui représente le spectre photovoltaïque de In_{0.67}Ga_{0.33}Sb enregistré à 6K en champ magnétique nul, avec et sans le système de division. L'amplitude des nombreuses structures dues à l'absorption de l'eau et du CO₂ est très nettement diminuée par l'utilisation du détecteur de référence.

III. Traitement et enregistrement des spectres

Afin de pouvoir amplifier les signaux détectés, l'intensité du faisceau lumineux est modulée à 85Hz à l'entrée du spectromètre (MA). La réponse de l'échantillon est envoyée sur un amplificateur à bas niveau de bruit PAR213 qui possède une impédance d'entrée variable. Le signal de sortie passe ensuite dans un amplificateur sélectif (AS) PAR210 synchronisé à 85Hz puis est envoyé sur un amplificateur synchrone (LI) PAR122 ou 220.

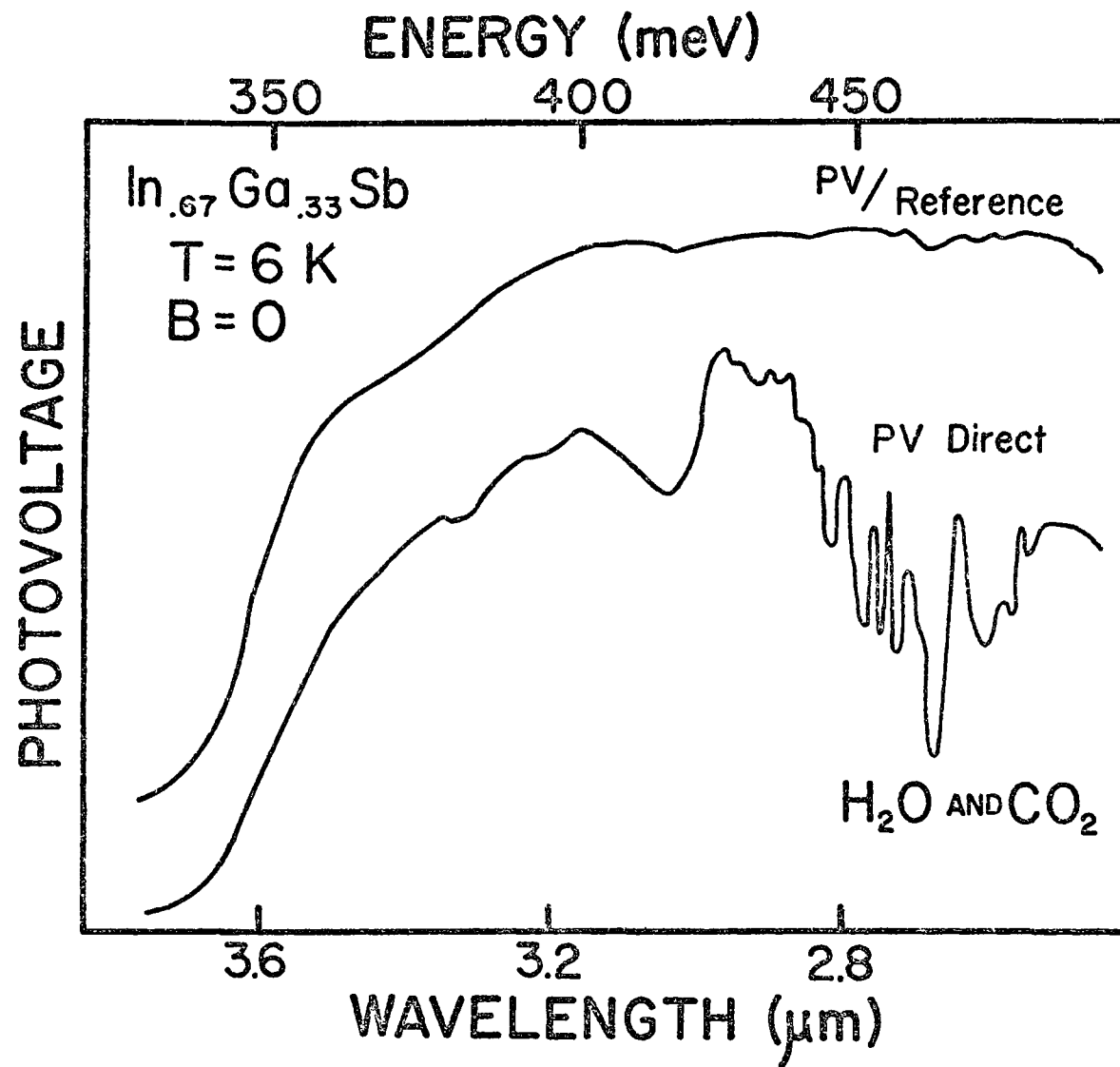


Figure 17

Exemple de l'efficacité du montage à double faisceau.

Le signal issu du détecteur pyroélectrique est traité de la même façon sur un système parallèle. Le rapport signal photovoltaïque/signal de référence est obtenu par une unité PAR230 (DV).

Les constantes de temps des différentes unités sont ajustées de façons identiques dans chacune des deux branches et réglées en fonction de la qualité des signaux. Pour une vitesse de balayage de $n \text{ \AA/s}$ du spectromètre et une résolution optique de $N \text{ \AA}$ on détermine τ la constante de temps maximum utilisable telle que:

$$n \tau \leq N$$

Avec des signaux de bonne qualité cette condition est facilement réalisable même pour un balayage spectral assez rapide ($5 \text{ \AA/s}$). Dans tous les cas, le temps de réponse des échantillons et du détecteur pyroélectrique sont nettement inférieurs à τ maximum. Nous avons utilisé des constantes de temps variant de 0.3 à 3 secondes. Le signal divisé est finalement envoyé sur un enregistreur graphique à vitesse variable. Un marqueur automatique de longueurs d'onde facilite le dépouillement des courbes enregistrées.

IV. Cryostat et bobines supraconductrices

Tous les échantillons étudiés ont d'abord été testés dans un cryostat à hélium liquide dans lequel une bobine supraconductrice donne un champ magnétique variable de 0 à 3 teslas. Ces tests ont permis de sélectionner les meilleurs échantillons c'est à dire principalement ceux donnant un signal photovoltaïque de bonne qualité.

Les mesures proprement dites ont ensuite été effectuées dans un second cryostat dans lequel le champ magnétique peut monter jusqu'à 7T. Cependant, les alliages de $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ ayant un fort pourcentage de InSb ($x < .2$) ont été étudiés seulement jusqu'à 3T, les résultats obtenus étant d'assez bonne qualité pour permettre une analyse satisfaisante sans qu'il

soit nécessaire de recourir à un champ magnétique plus intense. Les deux cryostats ne diffèrent essentiellement que par leur taille, le premier étant une copie à l'échelle 1/2 du second. Nous allons décrire ce dernier et nous donnerons les quelques différences entre les deux systèmes au fur et à mesure de la description. Une description détaillée de ces deux appareils a déjà été faite par ailleurs [F73, D75, R76].

A- Description des cryostats

Une coupe verticale du cryostat le plus grand est représentée sur la figure 18. En partant de l'extérieur on remarque une première enceinte à vide (12) enfermant complètement le reste de l'appareil. Dans cette enceinte se trouve une feuille de cuivre polie (13) cylindrique qui sert d'écran thermique et qui est percée de deux ouvertures au niveau des fenêtres optiques (16). A l'intérieur du volume délimité par cette feuille de cuivre, on trouve l'enceinte principale destinée à recevoir l'hélium liquide (5) et dans le bas de laquelle se trouve la bobine supraconductrice d'axe horizontal (6). Une enceinte d'azote liquide (2) entoure l'enceinte principale jusqu'au niveau du haut de la bobine. Dans l'enceinte principale, en plus de la bobine et des fils de cuivre (1) qui la relie à des connections situées sur la plaque supérieure du cryostat on remarque une tige verticale de matière plastique (4) le long de laquelle est attaché un morceau de fil de 50cm de long en alliage supraconducteur. Les deux extrémités de ce fil sont reliées à une boîte de contrôle extérieure qui permet de mesurer la résistance du fil. Ce système sert à mesurer le niveau d'hélium liquide dans le cryostat en connaissant la portion du fil qui est supraconductrice et donc de résistance nulle. Ce système a été utilisé dans d'autres montages expérimentaux [077] et donne une mesure

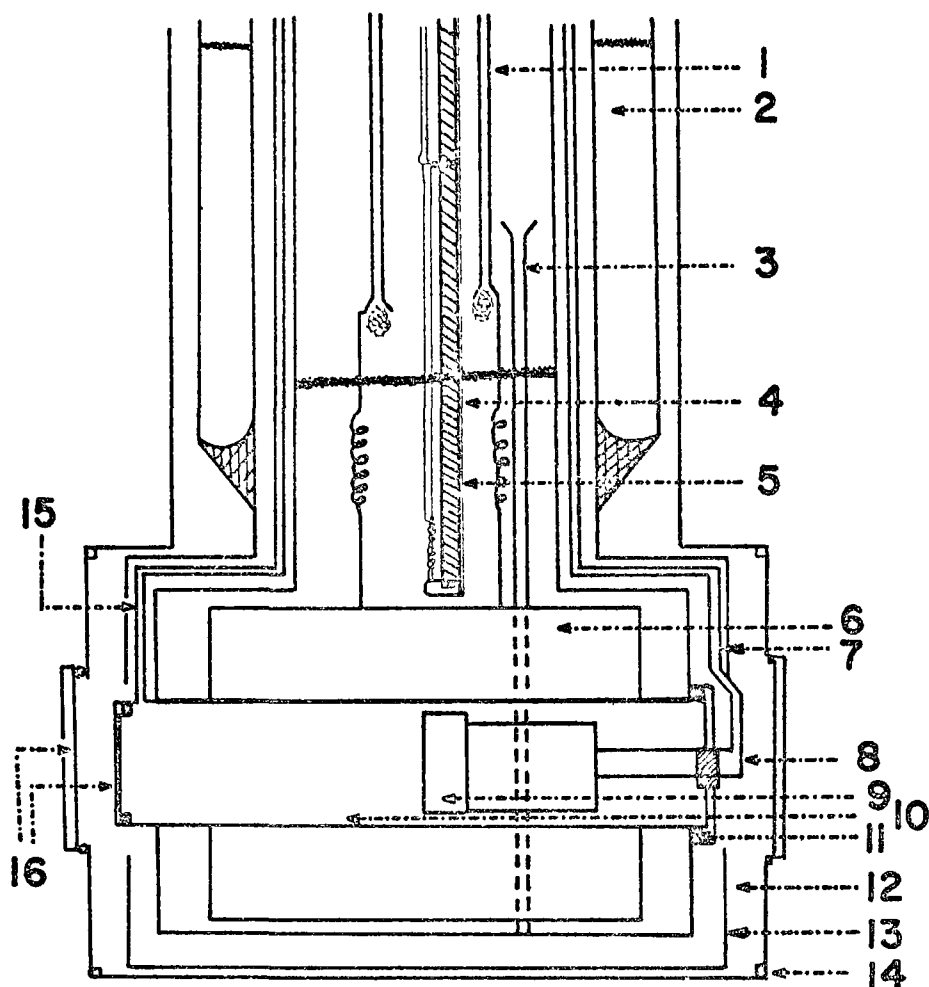


Figure 18

Coupe vertical du cryostat

- | | |
|---|---------------------------|
| 1. Tube de récupération d'hélium
et alimentation de la bobine. | 14. Joint torique. |
| 2. Azote liquide. | 15. Tube à hélium gazeux. |
| 3. Guide pour le transfert d'hélium. | 16. Fenêtres optiques. |
| 4. Fil supraconducteur - mesure de niveau. | |
| 5. Hélium liquide. | |
| 6. Bobine. | |
| 7. Fils de cuivre. | |
| 8. Plaque arrière. | |
| 9. Porte-échantillon. | |
| 10. Enceinte aux échantillons. | |
| 11. Joint d'indium. | |
| 12. Enceinte à vide. | |
| 13. Feuille de cuivre. | |

très précise. Dans le petit cryostat le niveau d'hélium est mesuré à l'aide de résistances au carbone espacées de quelques centimètres les unes des autres et dont la valeur à 4.2 K est préalablement déterminée; ce système moins précis est toutefois satisfaisant pour ce cryostat.

A l'intérieur de la bobine une dernière enceinte indépendante (10) est destinée à recevoir les échantillons (9). Elle est fermée à une extrémité par une fenêtre (16) et à l'autre par une plaque (8) portant des connections électriques permettant de relier les différents fils attachés au porte-échantillons avec l'extérieur du cryostat. La fenêtre est en quartz ou en saphire suivant le domaine de longueurs d'onde dans lequel on travaille. Cette fenêtre, de même que la plaque arrière, ferme hermétiquement l'enceinte grâce à un joint d'indium (11). Un tube en acier inoxydable (15) relie cette enceinte à l'extérieur et permet d'y introduire de l'hélium gazeux qui assure une température stable aux échantillons. Deux thermomètres, l'un au cuivre, l'autre au germanium sont situés dans le porte-échantillon (9) et donnent la température des spécimens. Lorsque l'équilibre thermique est atteint, le réservoir d'hélium liquide étant plein, cette température est de 6 K. Un ensemble de fils de cuivre (7) relie la plaque arrière à l'extérieur du cryostat et est connecté à une fiche femelle située en haut de l'appareil. Les signaux peuvent ensuite être sélectionnés par une boîte de contrôle et envoyés aux différents appareils de mesure.

B- Alimentation des bobines supraconductrices

La bobine de 7 teslas, en alliage Ni-Ti ($T_c = 9K$) est alimentée par un générateur Hewlett-Packard stabilisé et la variation du courant est contrôlée par un système électro-mécanique qui assure un taux de croissance optimal [F73]. La bobine de 3T est alimentée par la même source mais le

courant peut être contrôlé manuellement sans difficultés. Une résistance de 20Ω est montée à la sortie de l'alimentation en parallèle avec la bobine. Elle sert à augmenter la constante de temps du circuit afin d'atténuer les irrégularités de variation du courant dues au système électromécanique. Un pont de diodes en parallèle avec la bobine protège le système dans le cas où la bobine deviendrait subitement normale.

Les deux bobines ont été étalonnées en champ magnétique par le constructeur. Le contrôle du champ se fait en mesurant le voltage à travers une faible résistance étalon en série avec la bobine, ce qui revient à mesurer le courant passant dans celle-ci. La courbe d'étalonnage champ-courant donne alors l'intensité du champ magnétique. Les spécimens sur le porte-échantillon sont à peu près au centre géométrique de la bobine dans une région où le champ est uniforme à mieux que 1%.

IV. Procédure expérimentale

Nous donnons ici un bref aperçu de la méthode expérimentale employée. Elle a été partiellement mise au point au cours de nos propres recherches mais surtout lors des expériences réalisées par d'autres avant nous avec le même appareillage, à quelques modifications près. Certains détails ignorés ici sont décrits ailleurs [R76].

A- Prérefroidissement

Une fois les échantillons installés et les enceintes fermées on évacue l'enceinte à vide jusqu'à une pression de l'ordre de 10^{-5} Torr. Ce vide doit être bon au départ car dans un cryostat comme le nôtre, il est impossible de garder un vide statique une fois la pompe déconnectée. On évacue ensuite l'enceinte aux échantillons (vide primaire) pour pouvoir y introduire par la suite de l'hélium gazeux. Différentes méthodes de

prérefroidissement (300 K à 70 K) ont été essayées, la plus efficace consiste à remplir l'enceinte à hélium liquide avec de l'azote liquide en quantité suffisante pour abaisser la température de la bobine à 77 K (12 l pour le gros cryostat, 1 l pour le petit). On laisse ensuite l'azote s'évaporer ce qui prend de 2 à 3h pour le gros cryostat (30 à 45mn pour le petit). On remplit alors le réservoir à azote liquide et on le garde plein jusqu'au moment où l'on commence à transférer l'hélium liquide dans le cryostat. Le transfert doit se faire très lentement pour ne pas évaporer inutilement l'hélium. Il faut 15 litres pour que la bobine la plus grosse atteigne $T_c = 9K$, ce qui prend de 2h 30mn à 3h; 2 litres suffisent pour la plus petite ce qui prend 30mn. Pendant tout ce temps on mesure la résistance de la bobine, ce qui donne sa température. Une fois T_c atteint on peut transférer l'hélium plus rapidement et mesurer le niveau d'hélium liquide qui s'accumule dans le cryostat. Une hauteur de 25 à 30 cm au dessus du haut de la bobine est suffisante. On introduit alors de l'hélium gazeux sous faible pression dans l'enceinte aux échantillons.

Durant l'expérience le taux de perte d'hélium est d'à peu près 2.5 l/heure; une expérience complète sur 3 échantillons peut durer jusqu'à 24 heures, ce qui fait une consommation totale de 75 litres d'hélium liquide. Avec le petit cryostat, on utilise à peu près 25 l. L'hélium évaporé est récupéré au fur et à mesure, purifié et compressé avant d'être liquéfié à nouveau.

B- Mesures

L'ajustement optique a été fait avant la période de prérefroidissement mais doit être corrigé pour tenir compte des déplacements des échantillons dans le cryostat lorsque la température varie. Pendant la

période de refroidissement on contrôle la qualité des signaux photovoltaïques et on mesure éventuellement leur intensité en fonction de la température des échantillons. Une fois atteint $T = 6K$ on enregistre une série de spectres en champ nul puis, pour chaque spécimen une série de spectres à champ magnétique fixe tous les 0.5 teslas entre 0 et 7T. Si les signaux sont bruyants on enregistre plusieurs fois le même spectre afin de pouvoir éliminer par la suite tous les artefacts. On enregistre une dernière fois les spectres en champ nul en fin d'expérience. Les courbes enregistrées sur papier graphique sont ensuite analysées pour déterminer les énergies de transition expérimentales à comparer aux calculs théoriques. Les résultats sont présentés dans le chapitre suivant.

Pour conclure cette description disons que des expériences réalisées à plusieurs mois d'intervalle sur les mêmes spécimens pour diverses vérifications ont donné les mêmes résultats. Cela a été possible grâce à un montage permettant un contrôle précis des conditions expérimentales, amélioré au cours des années par ses utilisateurs. Dans la conclusion générale de ce travail, nous proposons quelques modifications à apporter en ce qui concerne en particulier l'acquisition des données.

C H A P I T R E IV

RESULTATS EXPERIMENTAUX ET ANALYSE

- I. Variation spectrale expérimentale du photovoltage
 - A- Champ magnétique nul
 - B- Champ magnétique non nul
 - 1. InSb polycristallin
 - 2. $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$
- II. Diagrammes des énergies de transition en fonction du champ magnétique
- III. Analyse des énergies de transitions
- IV. Test de la méthode d'analyse et paramètres de bandes de $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$

The experimental results are presented. Experimental spectra are shown and compared to the simple model of chapter II . The so-called "fan diagrams" of the transition energies versus magnetic field are given for the 15 samples studied. These diagrams are analyzed within the coupled band scheme of chapter I to determine the band parameters for each sample.

C H A P I T R E I V

RESULTATS EXPERIMENTAUX ET ANALYSE

Nous allons présenter dans ce chapitre l'ensemble des résultats expérimentaux obtenus sur l'alliage $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$. Les paramètres de bandes de InSb et GaSb monocristallins ont déjà été déterminés à plusieurs reprises par des expériences de magnéto-optique [A72,FI73,R72,RO77]. Nous avons cependant fait une série de mesures sur InSb polycristallin afin de tester la méthode d'analyse présentée au chapitre I. Les résultats concernant InSb seront donc comparés à ceux obtenus avec des spécimens monocristallins [P66,RO77]. Nous illustrerons les résultats par la présentation de quelques spectres enregistrés à diverses valeurs du champ magnétique. Nous discuterons de la méthode d'analyse numérique des énergies de transition et nous présenterons ensuite les paramètres obtenus pour l'alliage $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$. Leur variation en fonction de la composition sera comparée aux prédictions théoriques dans le chapitre suivant.

I. Variation spectrale expérimentale du photovoltage

A- Champ magnétique nul

Nous avons rappelé dans le chapitre II que le photovoltage créé à une barrière métal-semiconducteur variait avec le coefficient d'absorption α du semiconducteur (éq. 5 chap. II). Nous avons aussi étudié la forme de cette variation au voisinage de E_0 pour un semiconducteur non perturbé par un champ magnétique. Les courbes des figures 19 et 20 représentent les spectres photovoltaïques obtenus expérimentalement avec des cellules Au- $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ -In pour $x = 0.33, 0.42, 0.905, 0.92$ à 6K, en champ magnétique nul. Le maximum de pente est indiqué sur chacune des courbes par un trait vertical (M). L'énergie (E_0) obtenue par l'analyse des spectres en champ magnétique (Voir plus loin section III) est indiquée par un autre trait

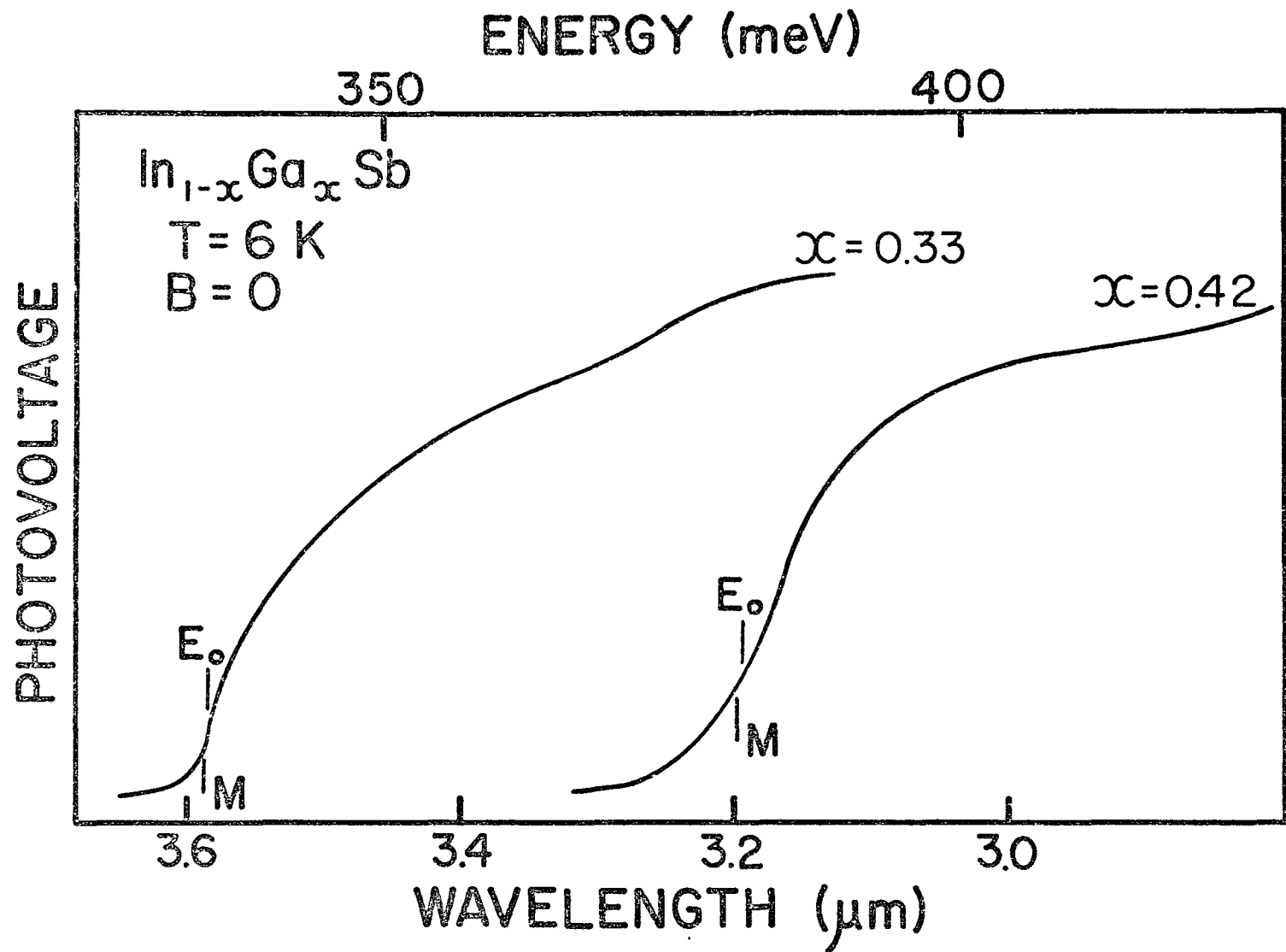


Figure 19

Spectres photovoltaïques de 2 échantillons de $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ ($x = 0.33$ et $x = 0.42$) à 6K et $B = 0$

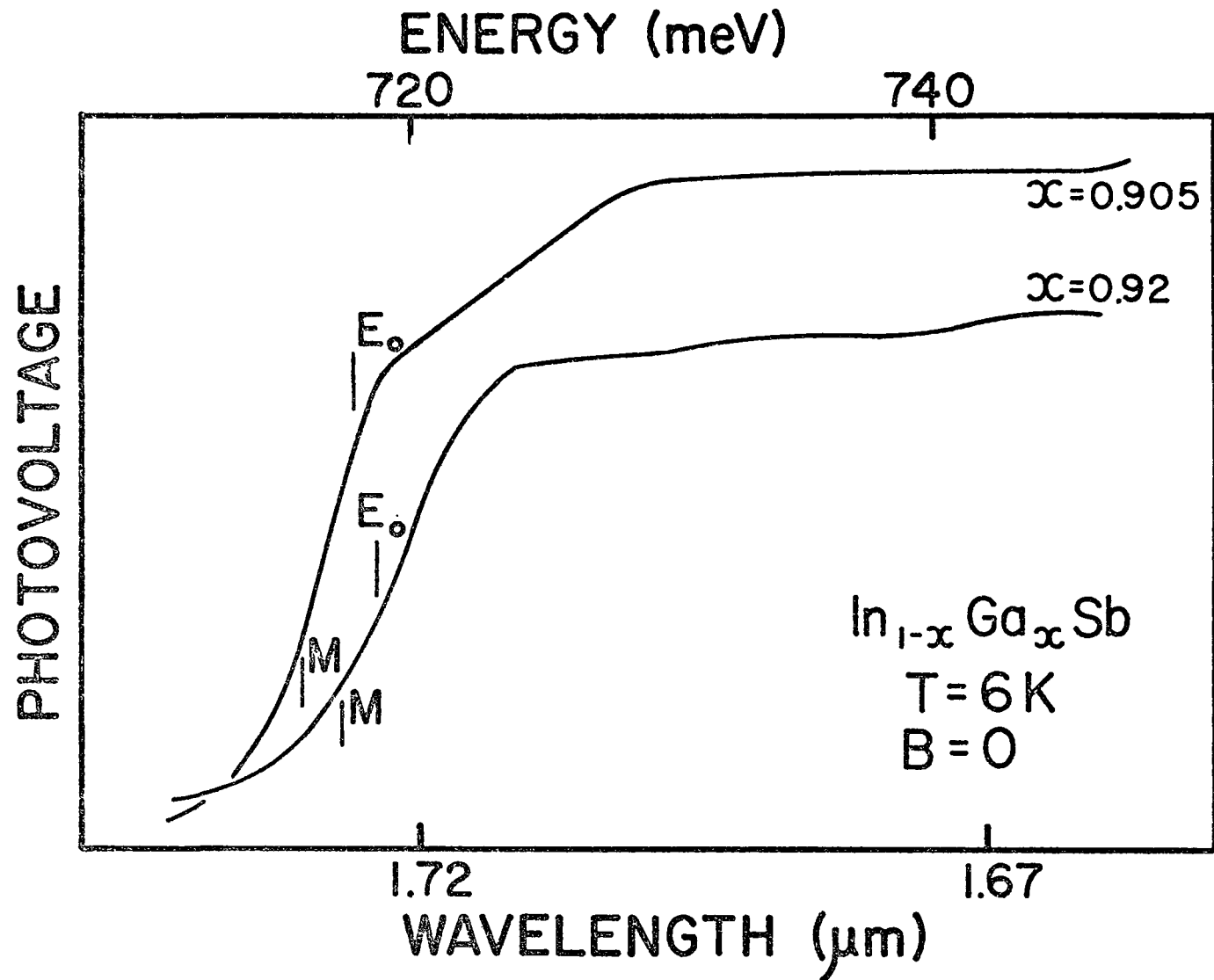


Figure 20

Spectres photovoltaïques de 2 échantillons de $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ ($x = 0.905$ et $x=0.92$) à 6K et $B=0$

vertical. On voit (figure 19) que E_0 correspond assez bien à M pour $x = 0.33$ et 0.42 alors que M apparaît à une énergie nettement inférieure à E_0 (figure 20) pour les deux autres spécimens. Cette différence peut être due à des effets excitoniques comme nous le suggérons par une approximation simple. L'énergie de liaison de l'exciton ($1s, \Gamma_g$) (notation de la référence B71) a été estimée à $E_b \approx 2$ meV (GaSb) et $E_b \approx 0.5$ meV (InSb). Supposons que cette énergie de liaison varie linéairement à travers l'alliage $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ (cette variation est probablement non linéaire dans la réalité [M74]). On obtient alors $E_b \approx 1.86$ meV ($x = 0.905$) et $E_b \approx 1.88$ meV ($x = 0.92$). Si l'on attribue le maximum de pente M à la transition excitonique, l'énergie E_0 du gap est donnée par

$$E_0 = M + E_b$$

et l'on trouve $E_0 \approx 718.1$ meV ($x = 0.905$) et $E_0 \approx 719.6$ meV ($x = 0.92$) alors que les valeurs obtenues par l'analyse des spectres en champ magnétique sont $E_0 = 718$ meV ($x = 0.905$) et $E_0 = 719$ meV ($x = 0.92$). Pour $x = 0.33$ et $x = 0.42$ les énergies de liaison de l'exciton peuvent être évaluées par la même méthode, elles sont de l'ordre de 1 meV ce qui correspond à l'erreur totale sur $E_0 - M$. Il faudrait donc introduire les effets excitoniques [J67] dans l'équation 7 du chapitre II qui donne le coefficient d'absorption à champ nul si l'on voulait déterminer E_0 à partir de ces spectres. Dans tout le reste de ce travail les valeurs de E_0 seront déterminées par l'analyse des transitions entre niveaux de Landau. En n'utilisant que celles qui ne sont pas influencées par les excitons on obtient une valeur de E_0 fiable.

B- Champ magnétique non nul

1) InSb polycristallin

Le modèle développé dans le chapitre I pour décrire les

semiconducteurs III-V perturbés par un champ magnétique montre que les transitions interbandes entre niveaux de Landau dans un monocristal sont anisotropes (figure 8), ce qui a été vérifié expérimentalement [P66].

Nous avons montré que cette anisotropie influençait l'allure des spectres obtenus avec des polycristaux qui devaient montrer des structures plus larges et moins nombreuses. C'est ce qu'on peut observer sur les courbes de la figure 21 qui représentent les spectres photovoltaïques expérimentaux obtenus avec InSb monocristallin [R077], $B//[111]$ et InSb polycristallin avec $B = 3T$. Les deux expériences ont été réalisées avec des spécimens de type n de même concentration ($n = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ à 300K). On remarque que les pics à participation excitonique observés dans le monocristal [R077] disparaissent (A) ou sont moins bien définis (B) dans le polycristal. Comme nous l'avons mentionné plus tôt (chap. I, V B) le déplacement des structures excitoniques en fonction du champ magnétique est anisotrope [AL74, C75].

On peut donc s'attendre dans le polycristal à un élargissement de ces structures et même éventuellement à leur disparition. Nous n'avons pas voulu explorer plus avant ce problème et dans toute notre analyse les premiers pics des spectres ne seront pas utilisés dans la détermination des paramètres de bande. Remarquons cependant qu'il serait intéressant d'étudier les excitons dans les alliages semiconducteurs afin de déterminer par exemple la variation de leur énergie de liaison en fonction de la composition [M74].

Sur la figure 22 nous avons comparé le spectre expérimental obtenu avec InSb polycristallin à $B = 3T$ au spectre théorique calculé avec les relations (5) et (10) du chapitre II. Les énergies de transition utilisées dans la relation qui donne $\alpha(B)$ (10, chap. II) ont été calculées à l'aide des matrices $H'_{oa}{}^{44}$ et $H'_{ob}{}^{44}$ (38 et 39 chap. I). Les paramètres de

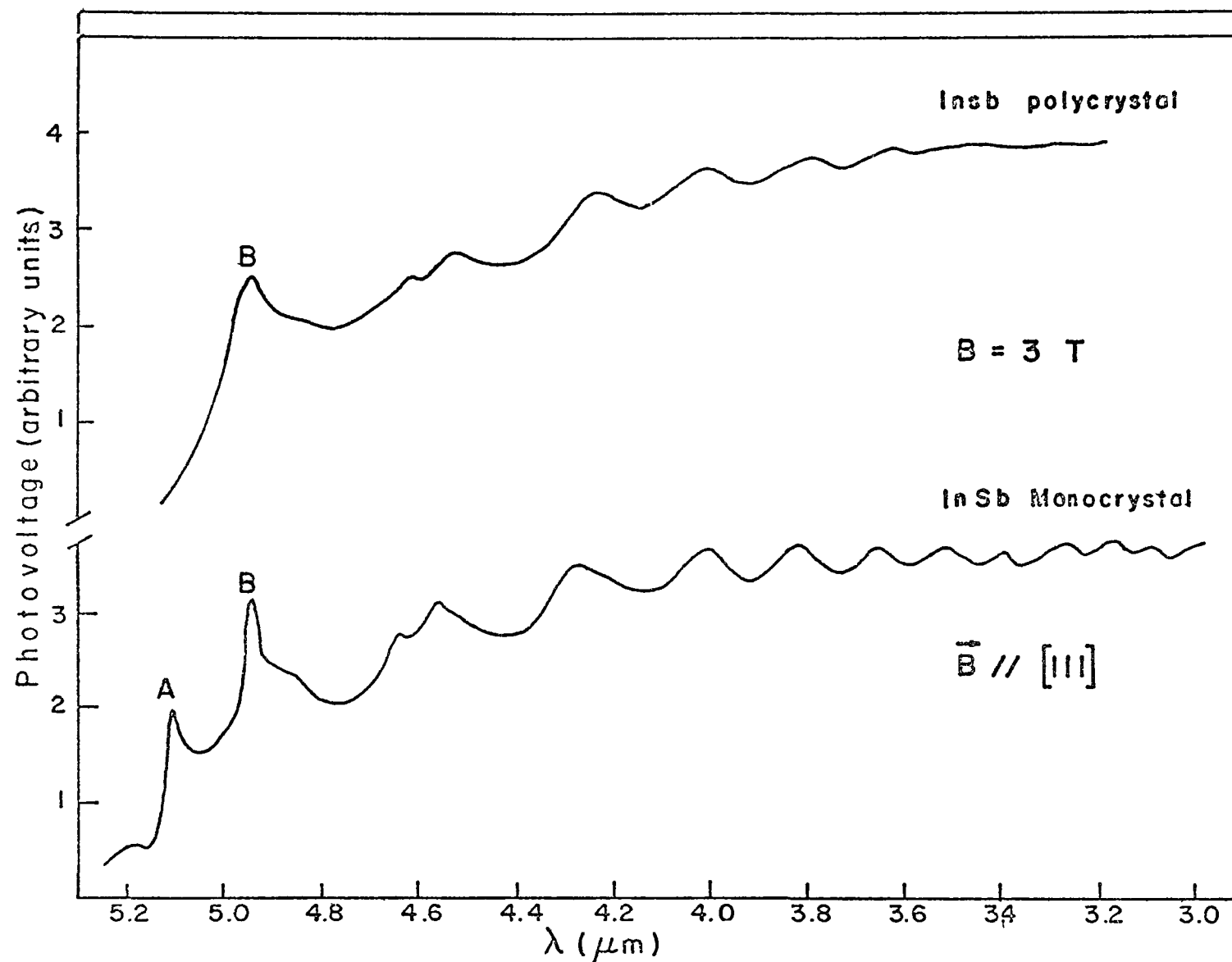


Figure 21

Comparaison des spectres photovoltaïques expérimentaux de InSb polycristallin et monocristallin avec

$B = 3\text{T}$

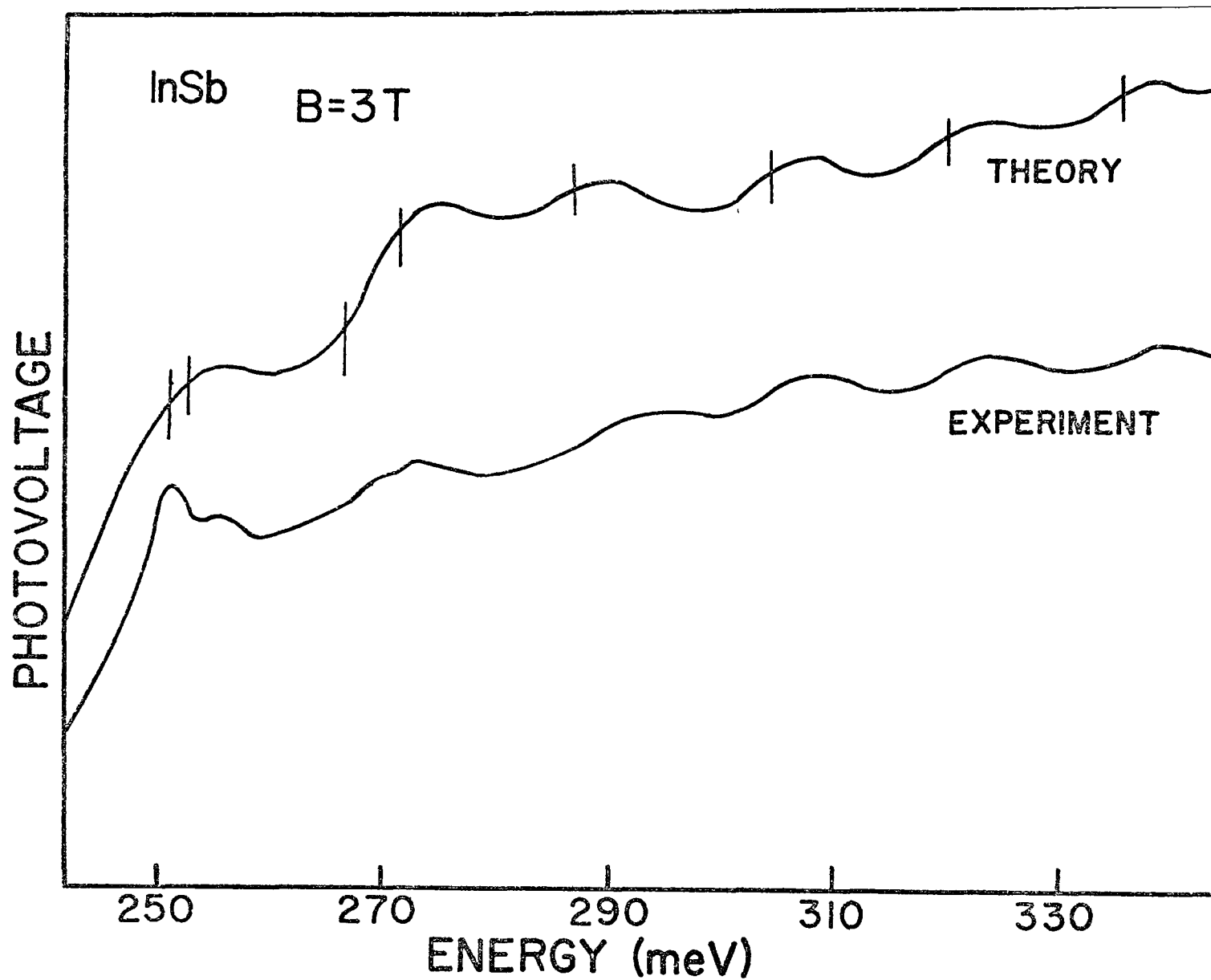


Figure 22

Comparaison des spectres photovoltaïques de InSb polycristallin calculé et observé expérimentalement avec $B = 3\text{ T}$. Les traits verticaux indiquent les énergies de transitions.

bandes du modèle sont ceux que nous avons obtenus par l'analyse complète des énergies de transitions observées à diverses valeurs du champ (voir plus loin section III de ce chapitre). Nous verrons qu'ils coïncident assez bien avec ceux caractérisant des échantillons monocristallins. Les matrices ont été diagonalisées pour la valeur moyenne sur 4π de $f(\theta, \phi)$ (34 chap. I) qui décrit l'anisotropie des niveaux de Landau en première approximation. Les énergies de transitions sont indiquées par des traits verticaux, elles correspondent à mieux que 0.5 meV aux maximums de pente sauf pour les premières structures. Il faut rappeler que non seulement les effets excitoniques ne sont pas inclus dans le calcul du photovoltage mais aussi que le coefficient $\alpha(B)$ a été calculé en tenant compte uniquement des trous lourds. En réalité les transitions à partir des niveaux de trous légers, avec leurs excitons associés [AL74] participent aux structures apparaissant aux plus basses énergies [P66, R077, voir aussi le tableau IV 1].

Nous avons donc observé expérimentalement l'élargissement et la diminution du nombre d'oscillations dans les spectres photovoltaïques réalisés avec des polycristaux (figure 21) comme le modèle de bandes couplées du chapitre I le prédisait. En outre, les résultats de la figure 22 montrent que l'analyse des spectres photovoltaïques en champ magnétique peut être faite avec une précision satisfaisante en choisissant pour énergies de transition les maximums de pente sur ces spectres.

2) $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$

Un total de 130 spectres différents a été enregistré sur les 15 échantillons de $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ qui ont servi à obtenir les résultats présentés dans ce chapitre. Nous avons choisi quelques courbes représentatives pour illustrer ces spectres. Les figures 23 et 24 représentent la variation spectrale du photovoltage obtenue à 6K avec des échantillons dont la

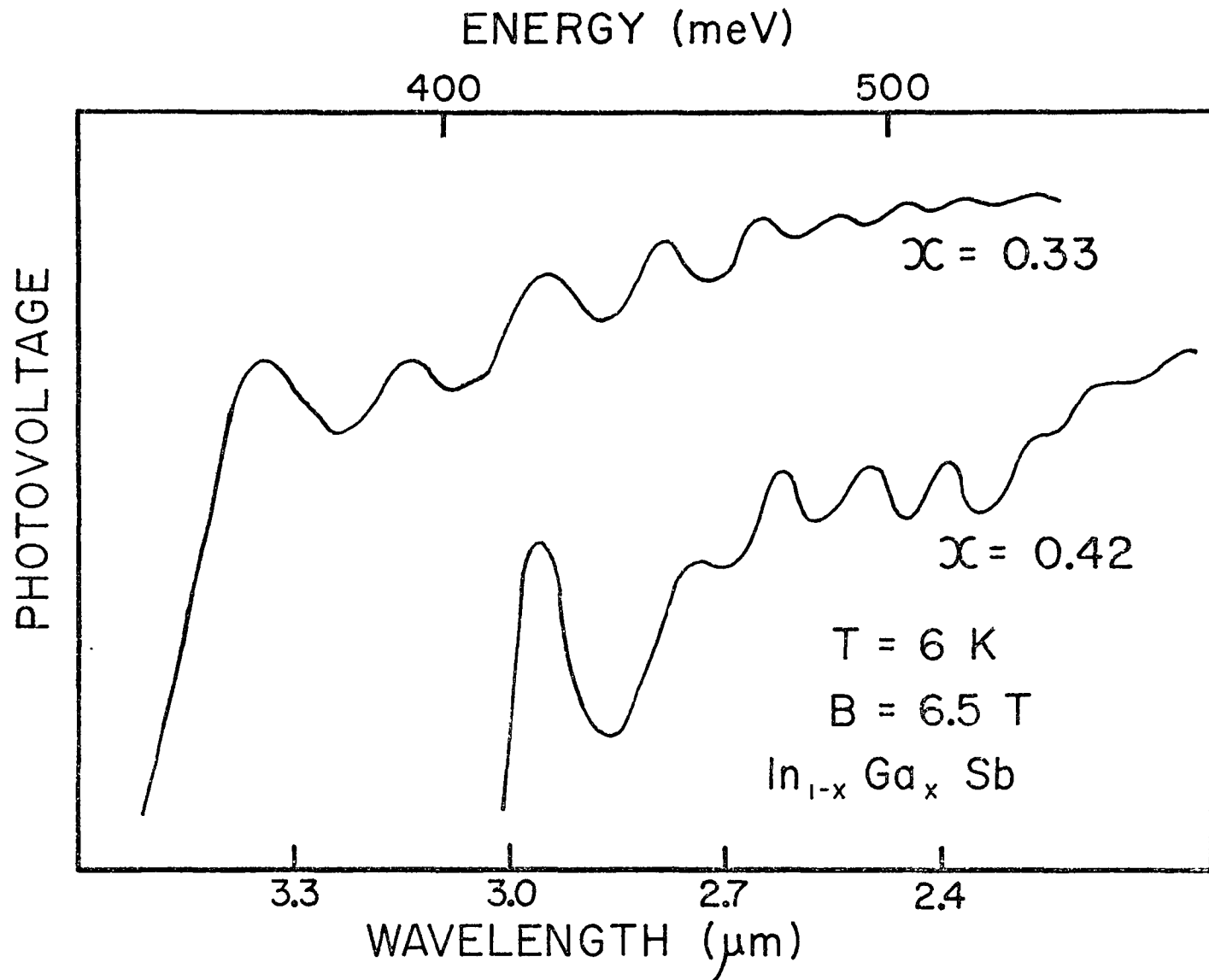


Figure 23

Spectres expérimentaux de deux échantillons de $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ ($x=0.33$ et $x=0.42$) à 6K
et $B=6.5\text{T}$

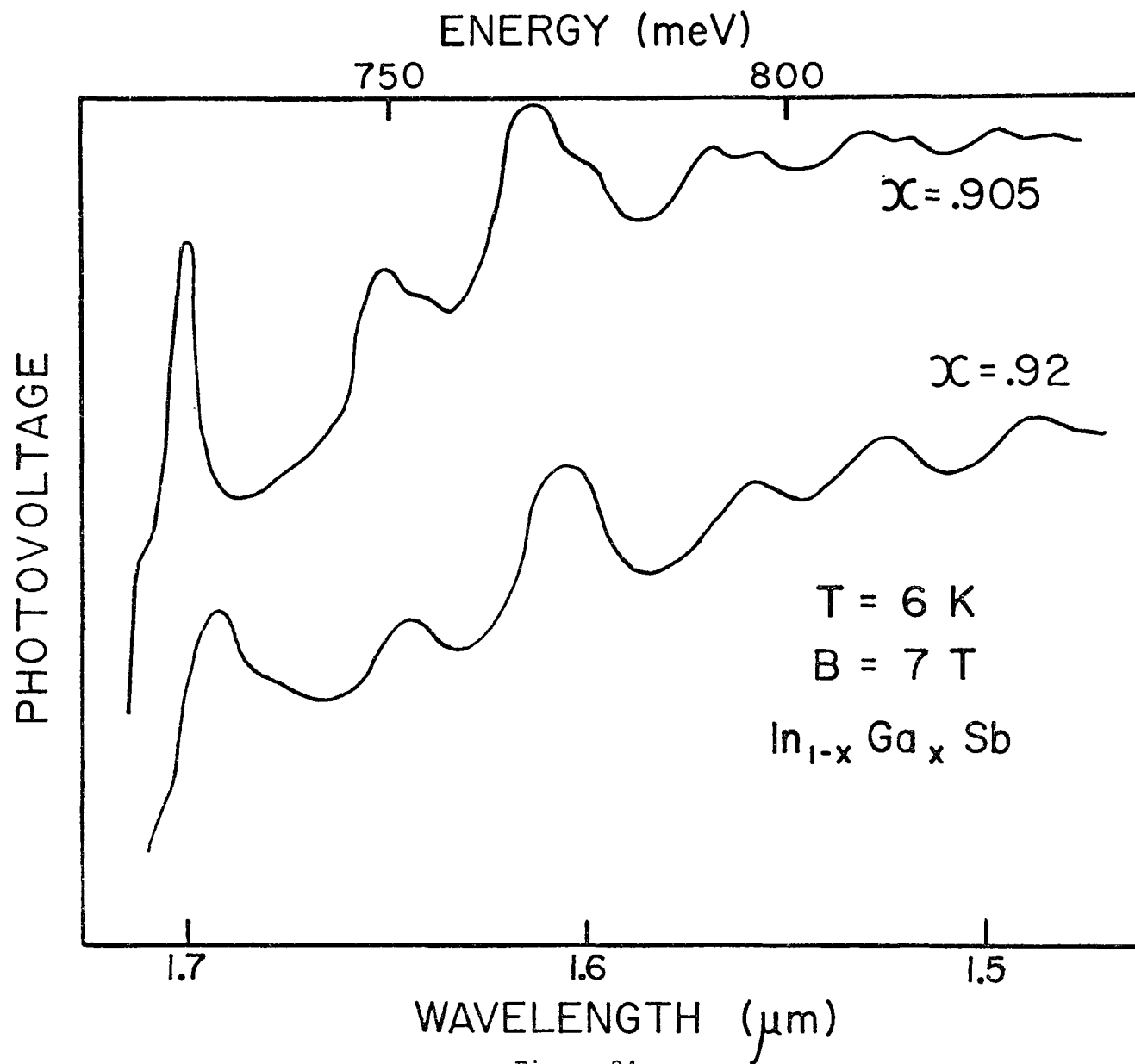


Figure 24

Spectres expérimentaux de deux échantillons de $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ ($x = 0.905$ et $x = 0.92$) à 6K
et $B = 7\text{T}$

composition est donnée par $x = 0.33; 0.42$ ($B = 6.5T$) et $x = 0.905; 0.92$ ($B = 7T$). Comme dans le cas de InSb présenté sur la figure 21 les effets excitoniques peuvent influencer les pics de plus basse énergie et le nombre d'oscillations observées est relativement limité. Cette limitation est, dans la plupart des cas due aux effets d'anisotropie décrits au cours du chapitre I. Dans d'autres cas cependant, l'influence de certaines bandes d'absorption de l'eau et de CO_2 sur les spectres n'a pu être complètement éliminée par le système de division et nous avons du alors restreindre le domaine d'énergie examiné. Le choix des compositions étudiées a d'ailleurs été dicté en partie par la présence de ces bandes d'absorption.

Pour chaque échantillon, des spectres photovoltaïques ont été enregistrés tous les $0.5T$, de 0 à $3T$ pour les compositions $x \leq 0.13$ et de 0 à $7T$ pour $0.27 \leq x \leq 0.92$. Les énergies de transition sont ensuite mesurées sur chaque spectre et peuvent être alors analysées en fonction du champ magnétique.

II. Diagrammes des énergies de transition en fonction du champ magnétique

Les quinze figures notées 25/i(x), avec i variant de 1 à 15 et (x) indiquant la composition de l'échantillon étudié, représentent les énergies de transition expérimentales ainsi que la variation théorique de ces énergies en fonction de B. La taille des points correspond à l'erreur expérimentale. Les transitions sont identifiées dans le tableau IV 1 avec la notation standard [P66]. Avant d'entrer dans l'analyse de ces diagrammes on peut noter qu'ils ont tous la même allure et que, sur chaque figure, les lignes théoriques convergent à champ nul vers une même énergie qui est E_0 , le gap ($\Gamma_6 - \Gamma_8$, figure 1 chap I) du spécimen correspondant. Les

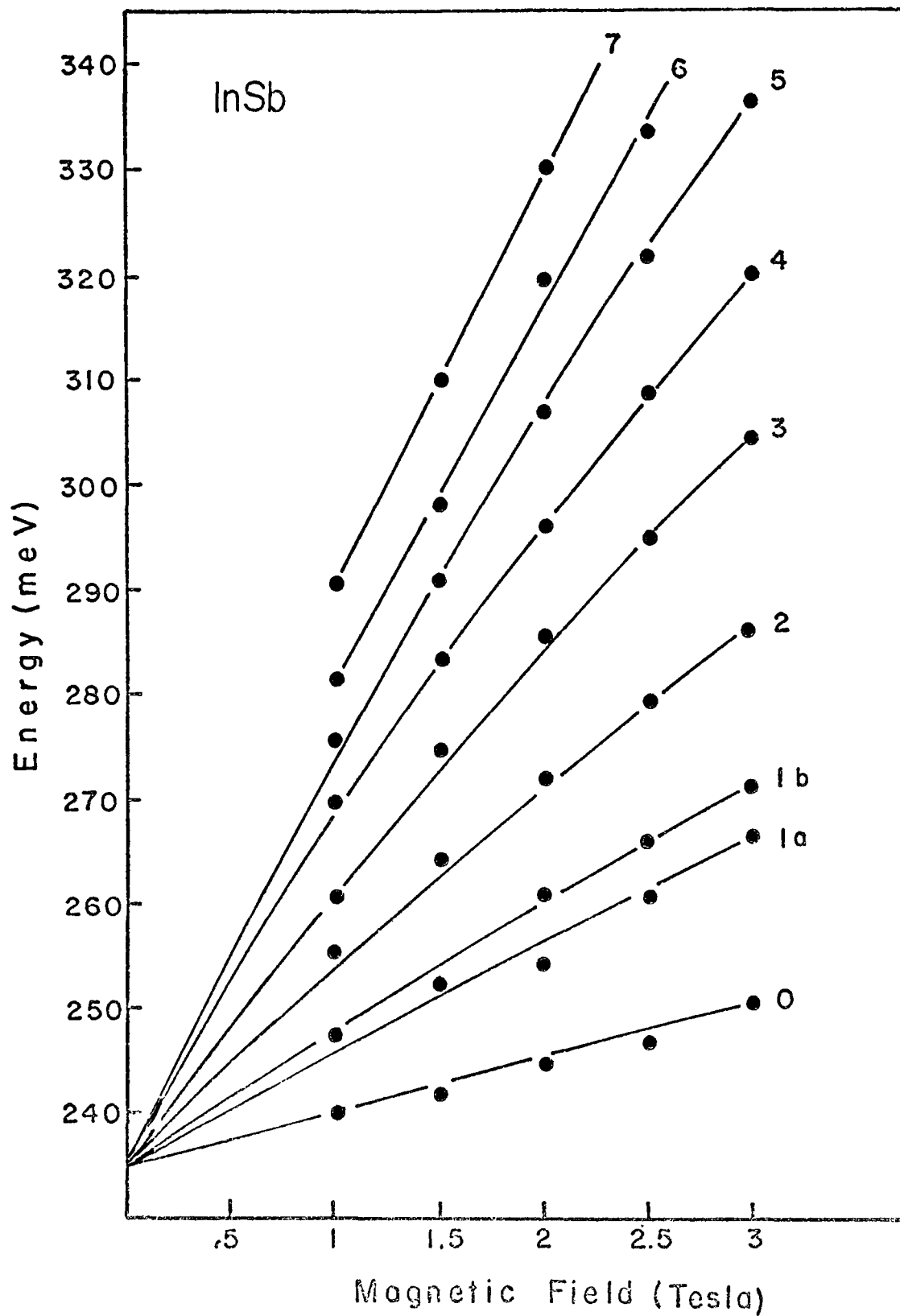


Figure 25/1(0)

Diagramme des énergies de transition en fonction du champ magnétique dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ ($x = 0$)

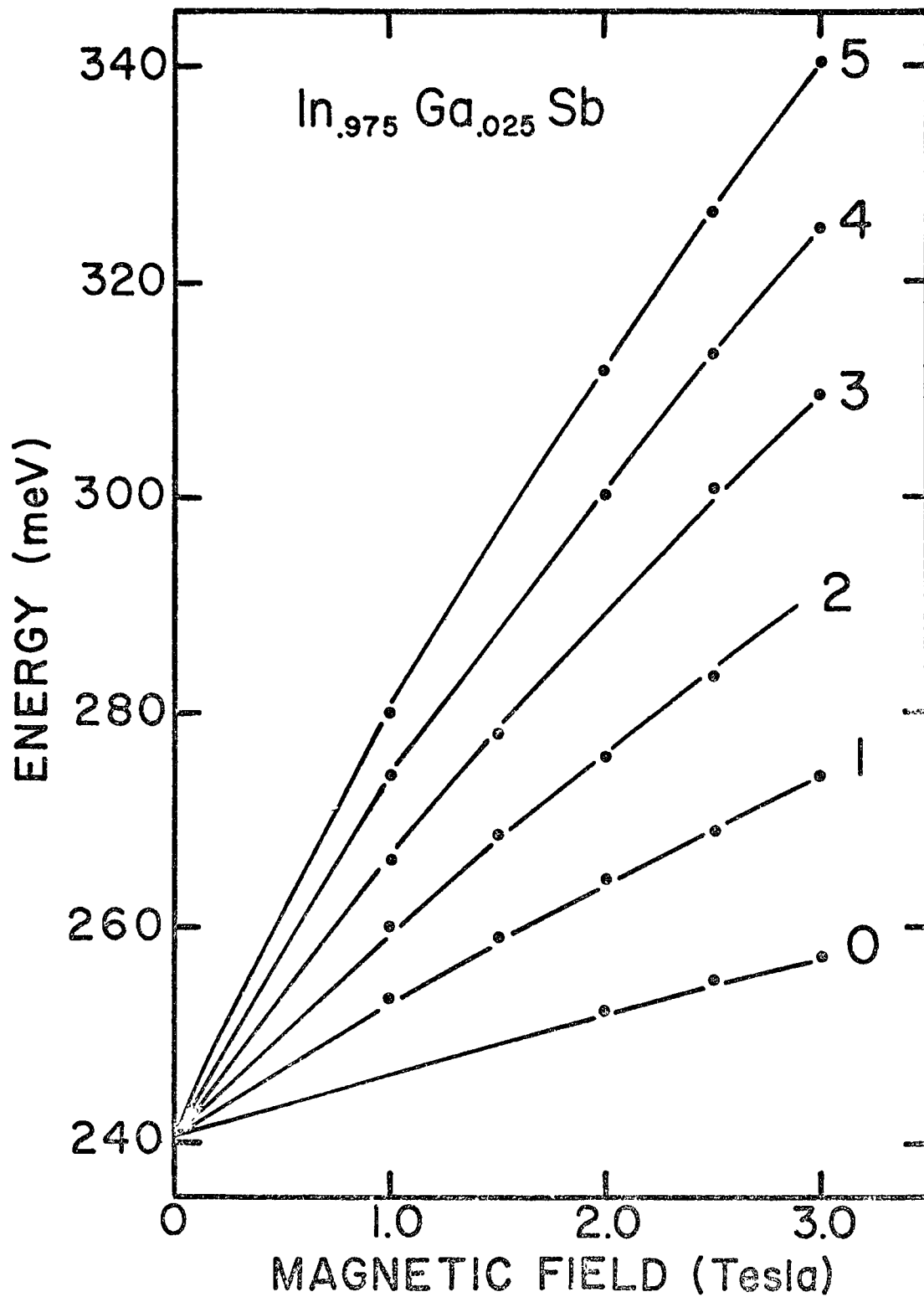


Figure 25/2 (25)

Diagramme des énergies de transition en fonction du champ magnétique dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ ($x = 0.025$)

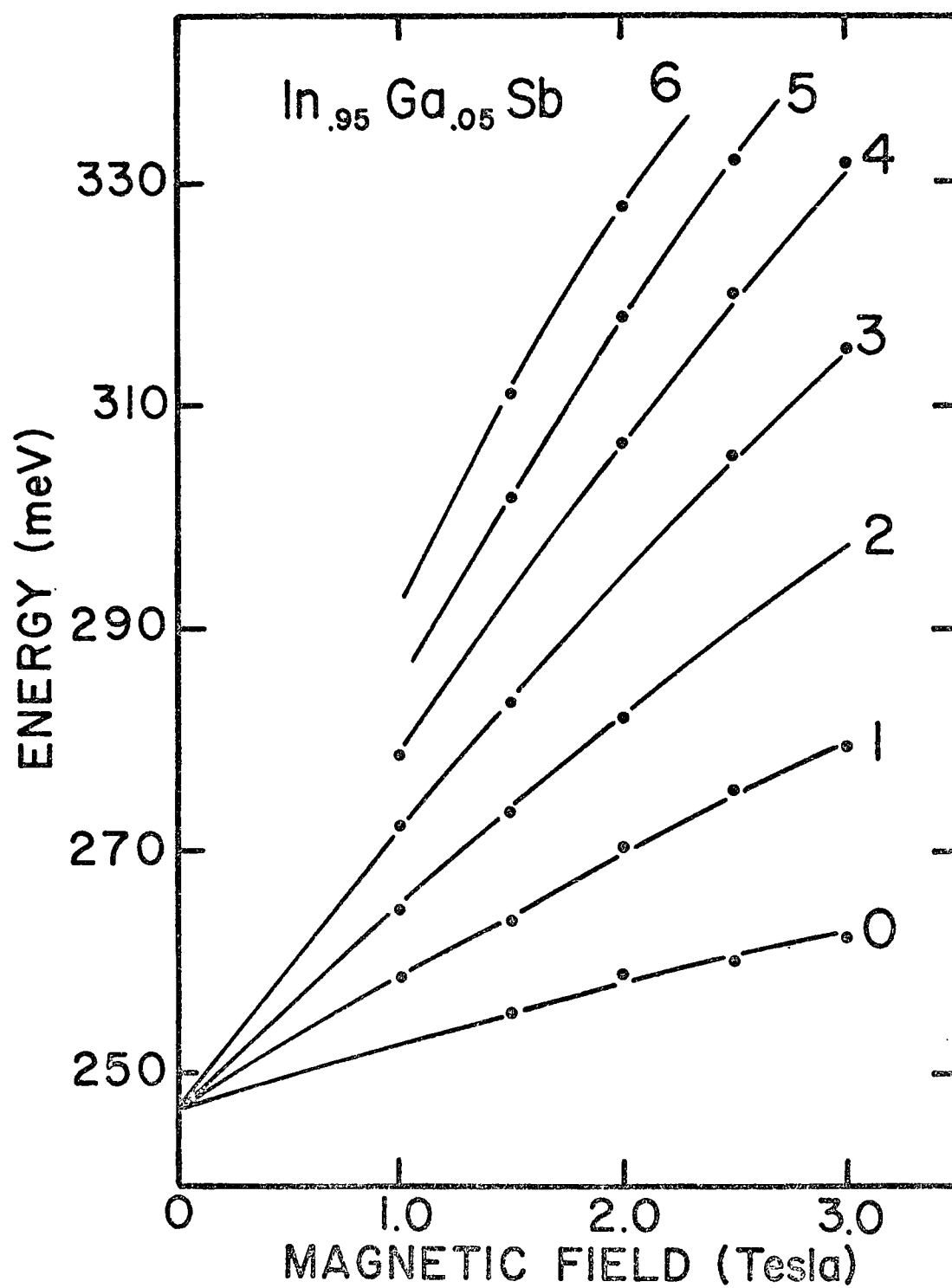


Figure 25/3(50)

Diagramme des énergies de transition en fonction du champ magnétique dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ ($x = 0.05$)

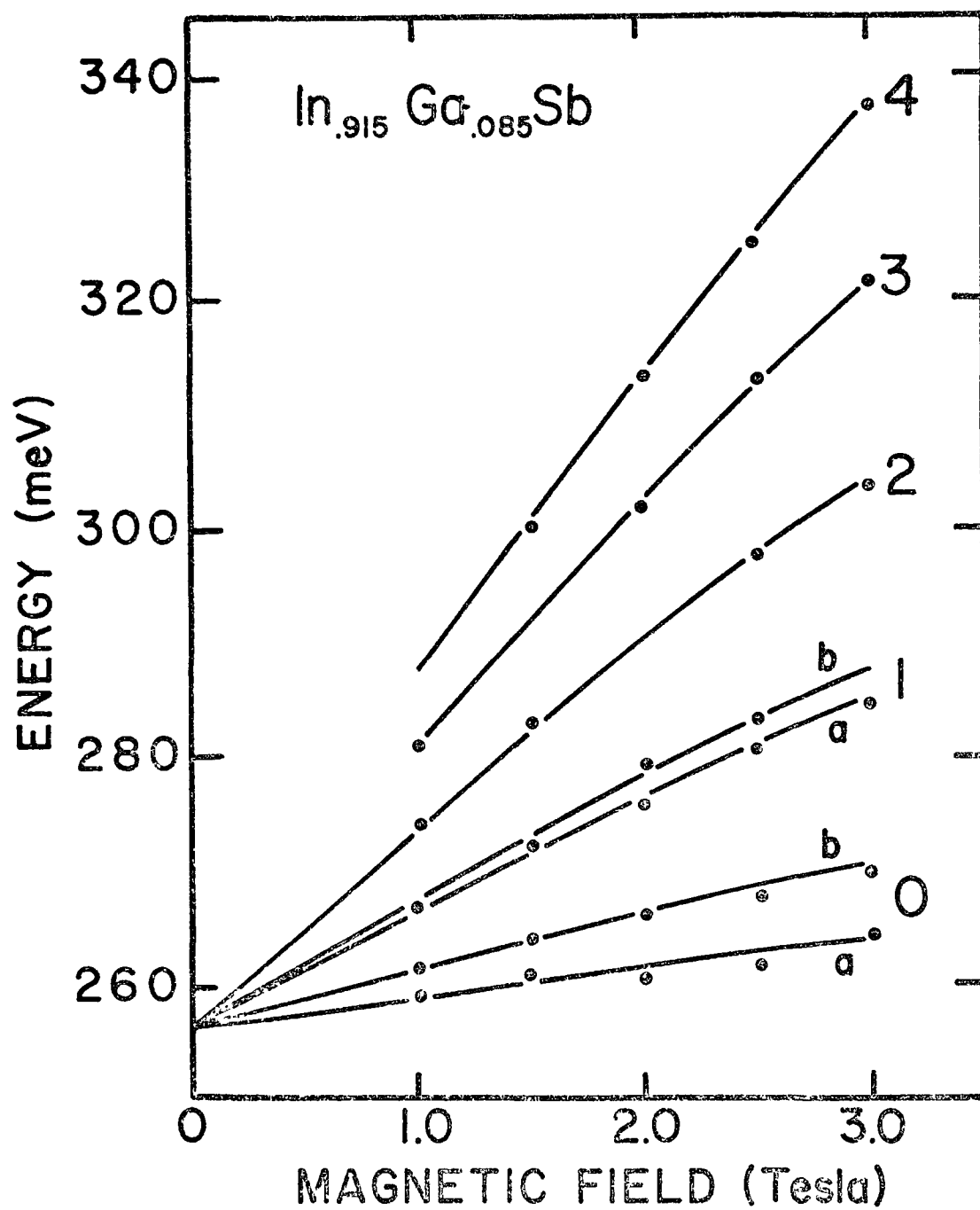


Figure 25/4(85)

Diagramme des énergies de transition en fonction du champ magnétique dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ ($x = 0.085$)

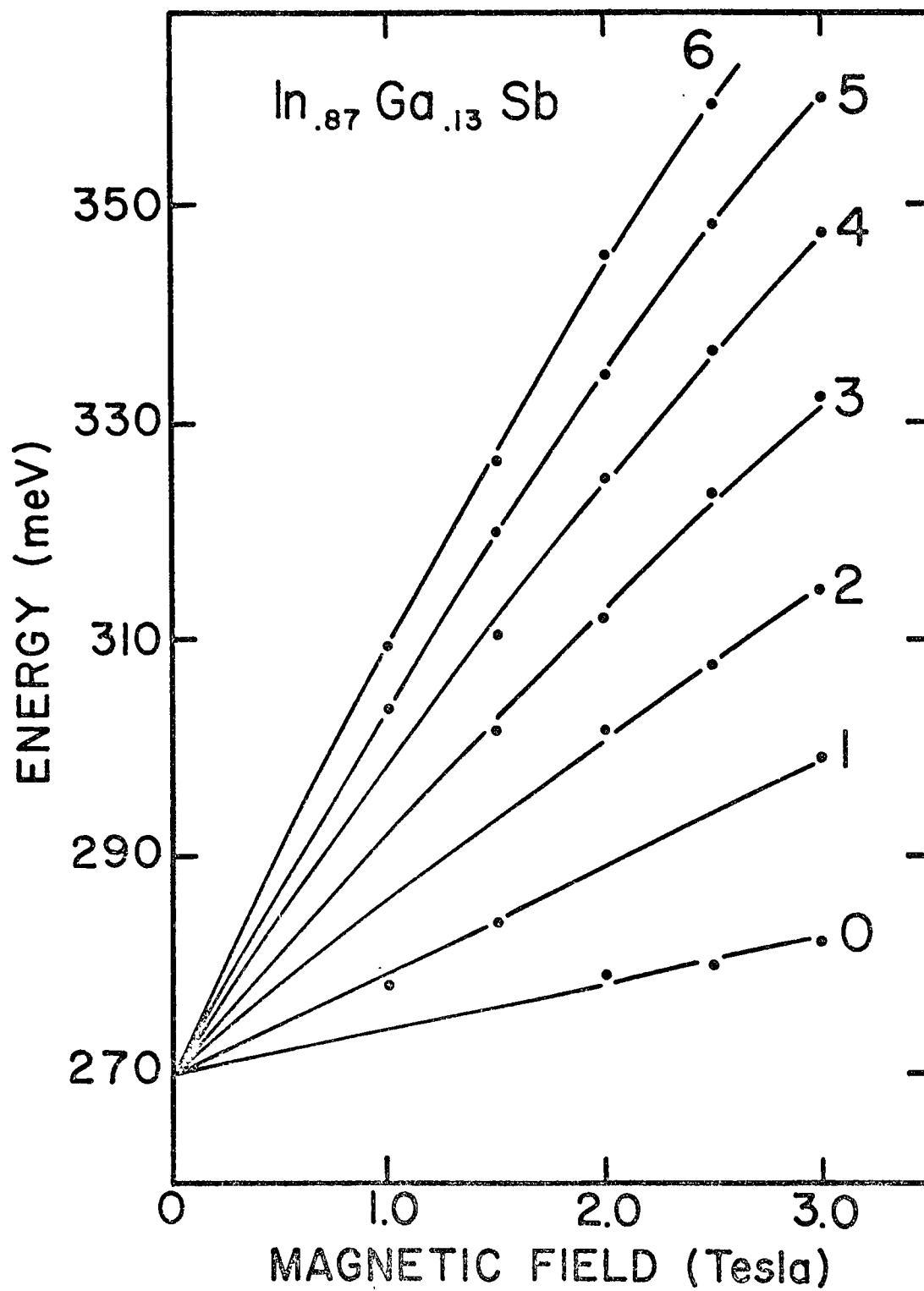


Figure 25/5(130)

Diagramme des énergies de transition en fonction du champ magnétique dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ ($x = 0.13$)

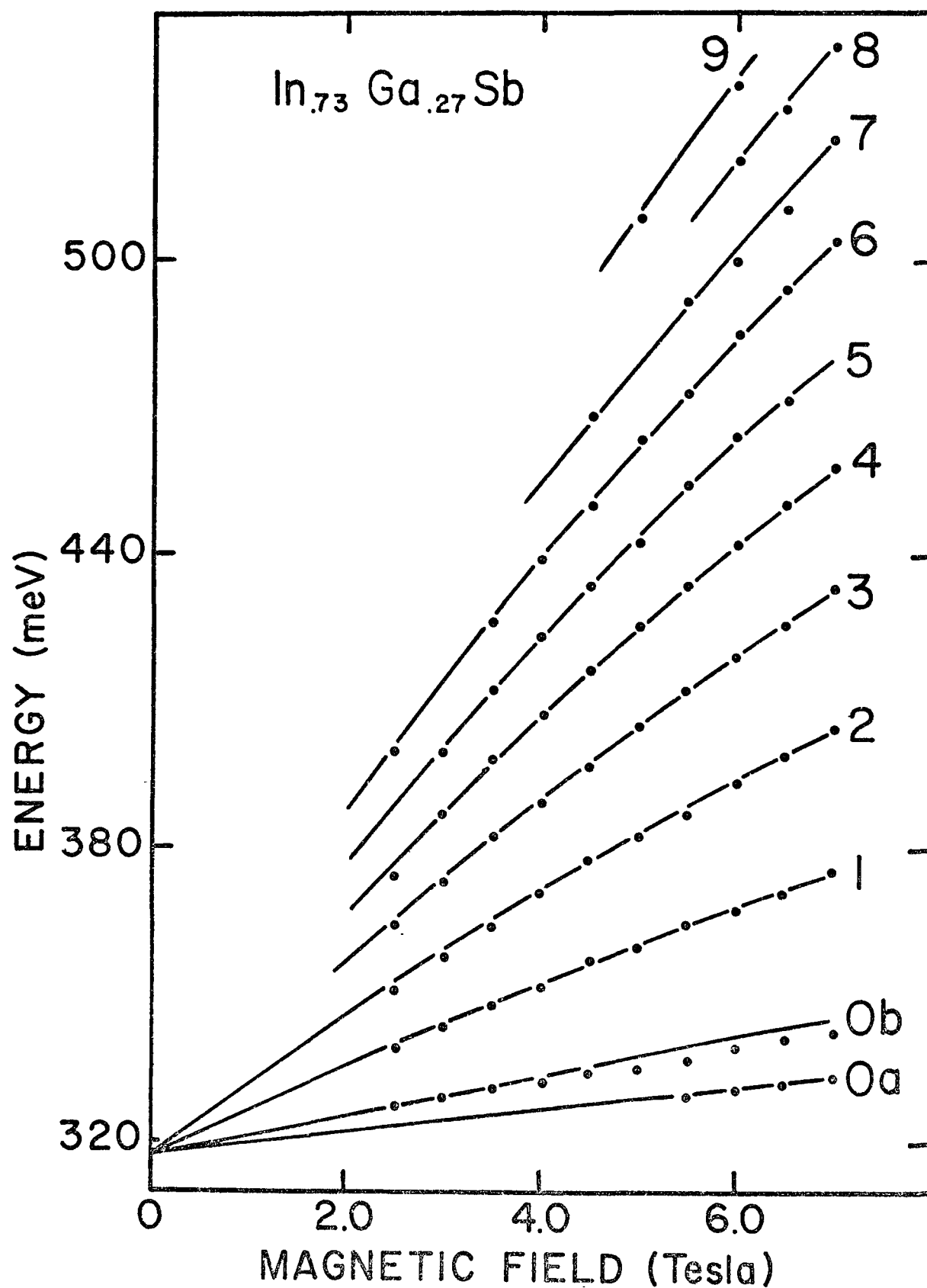


Figure 25/6(270)

Diagramme des énergies de transition en fonction du champ magnétique dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ ($x = 0.27$)

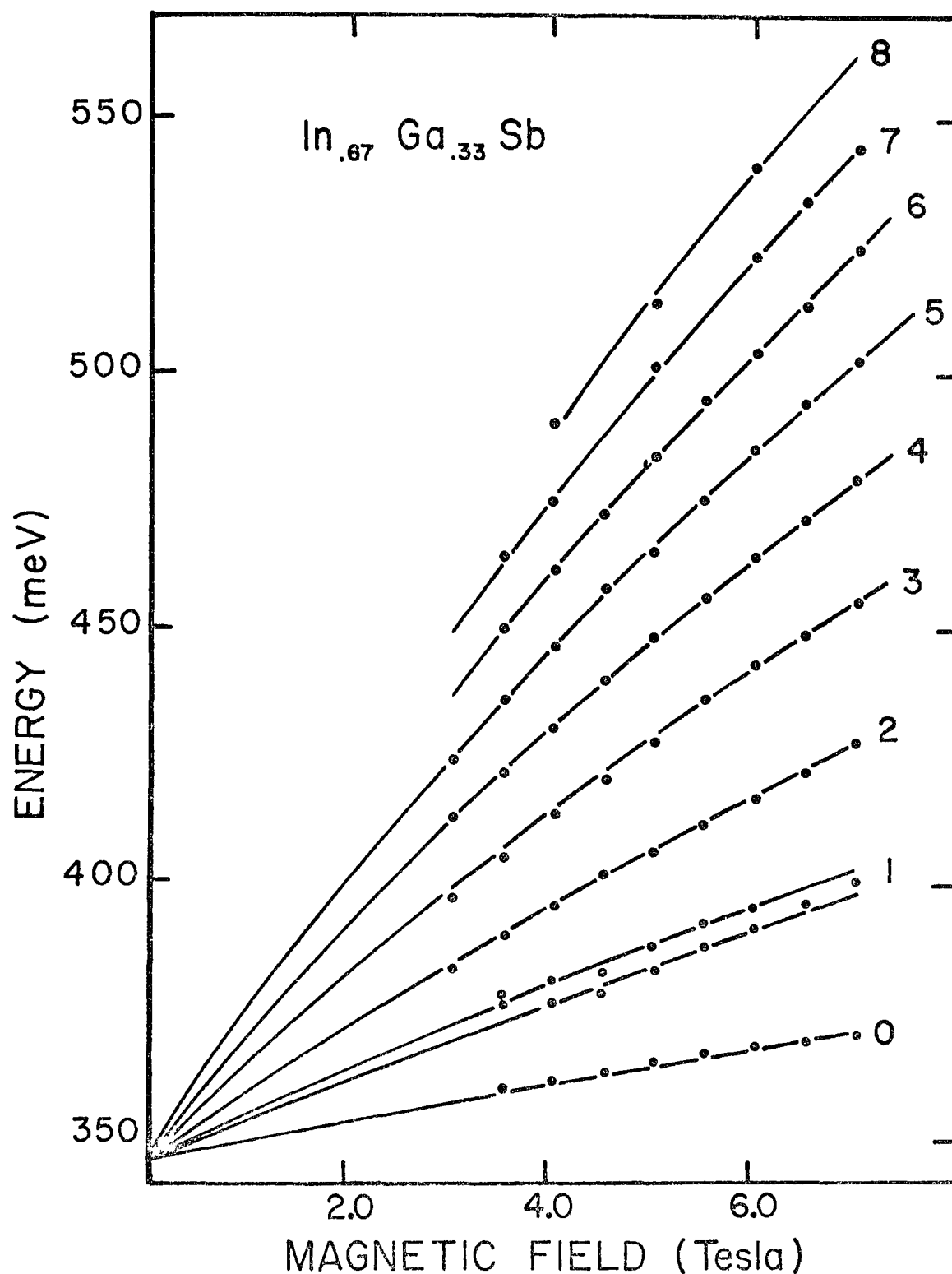


Figure 25/7(330)

Diagramme des énergies de transition en fonction du champ magnétique
dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ ($x = 0.33$)

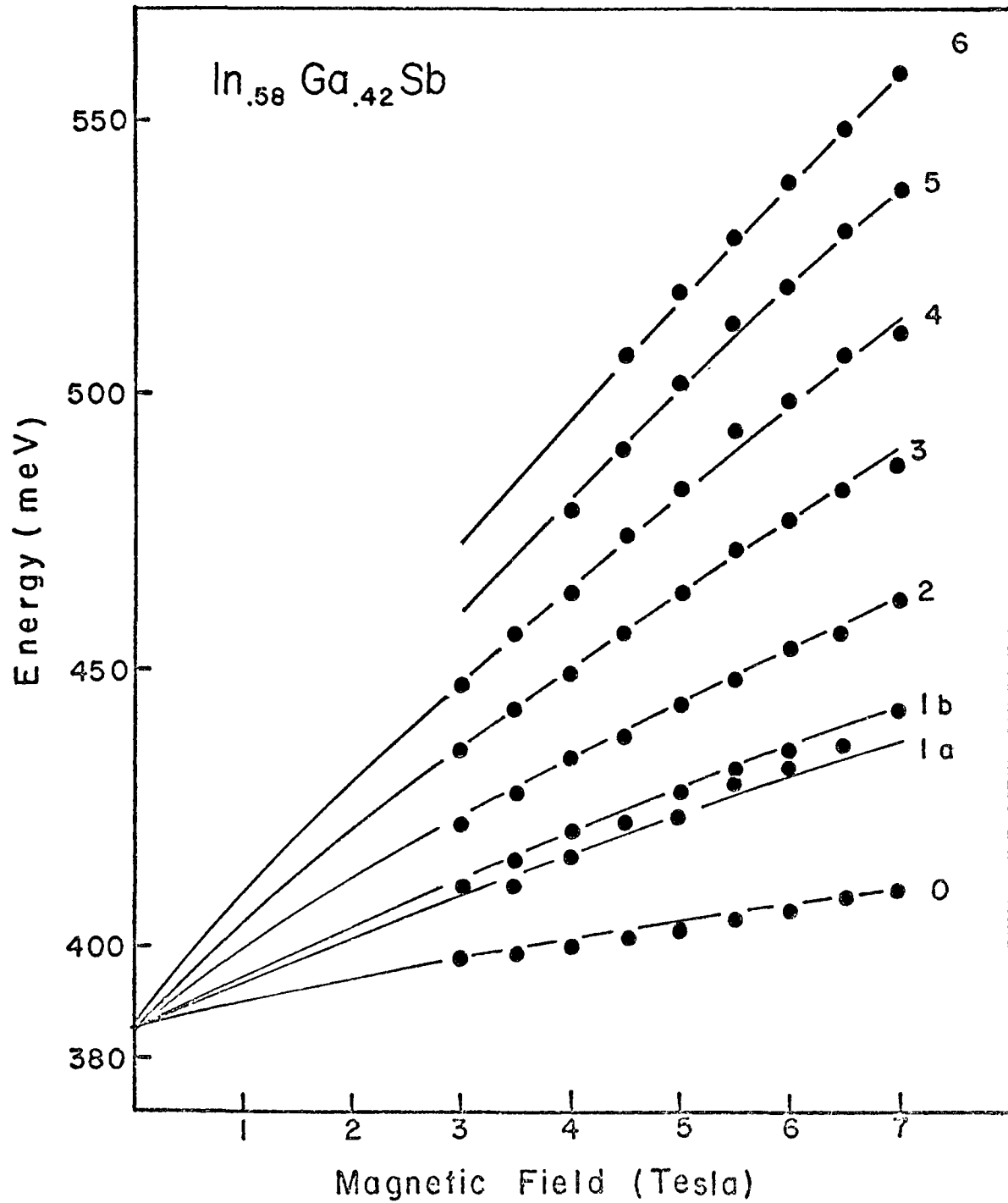


Figure 25/8/(420)

Diagramme des énergies de transition en fonction du champ magnétique
dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ ($x = 0.42$)

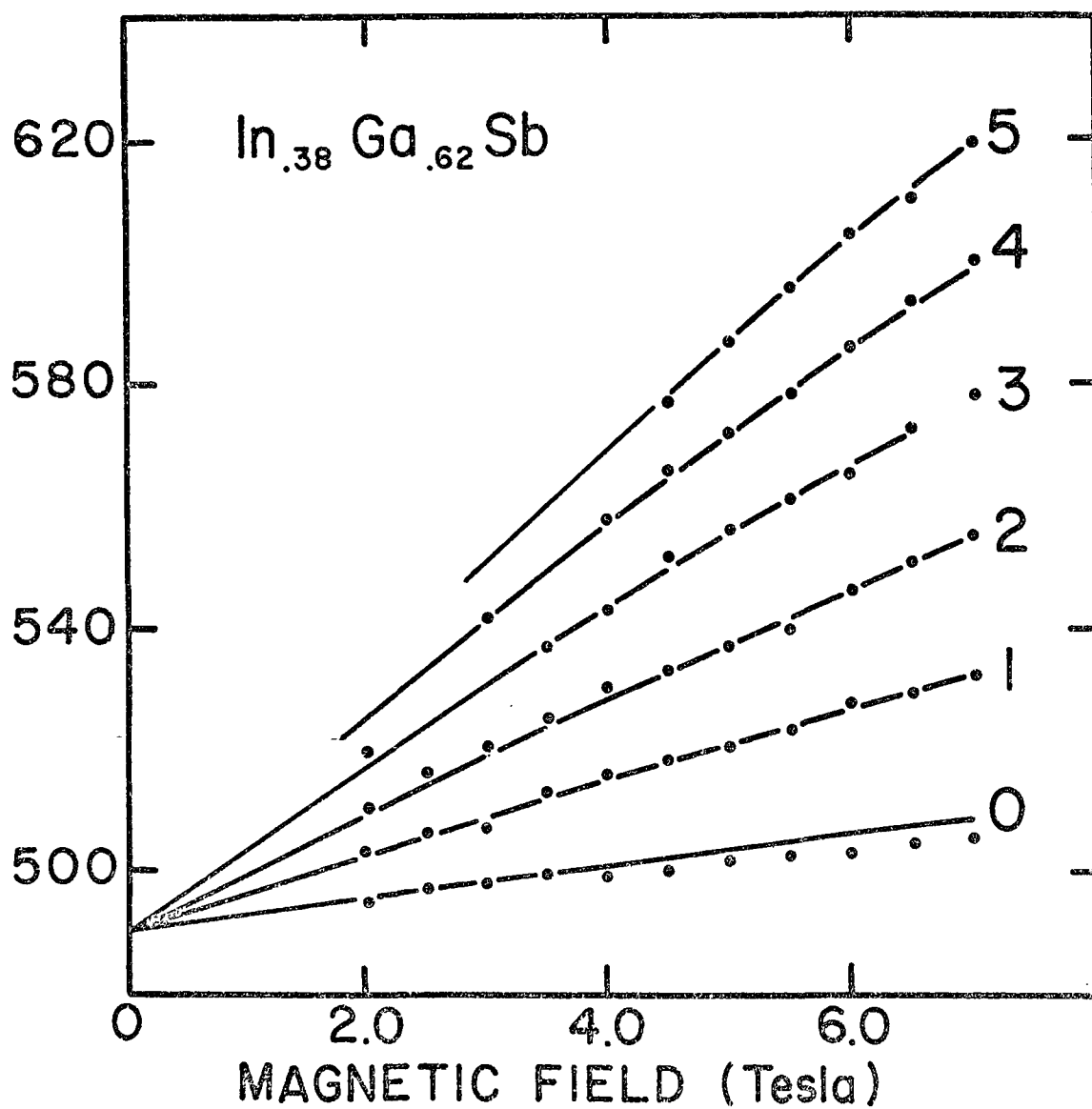


Figure 25/9(620)

Diagramme des énergies de transition en fonction du champ magnétique dans
 $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ ($x = 0.62$)

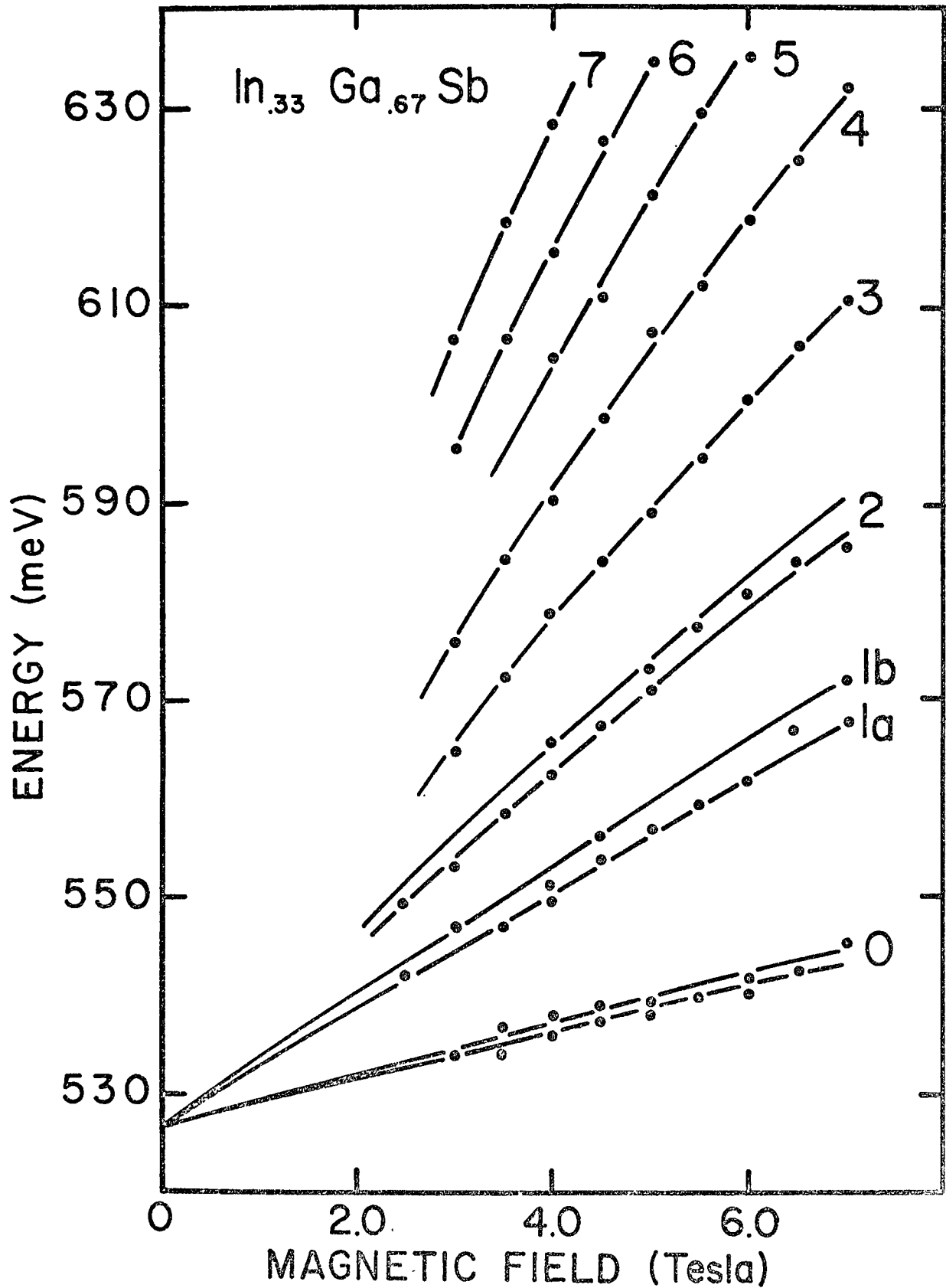


Figure 25/10(670)

Diagramme des énergies de transition en fonction du champ magnétique dans

$\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ ($x = 0.67$)

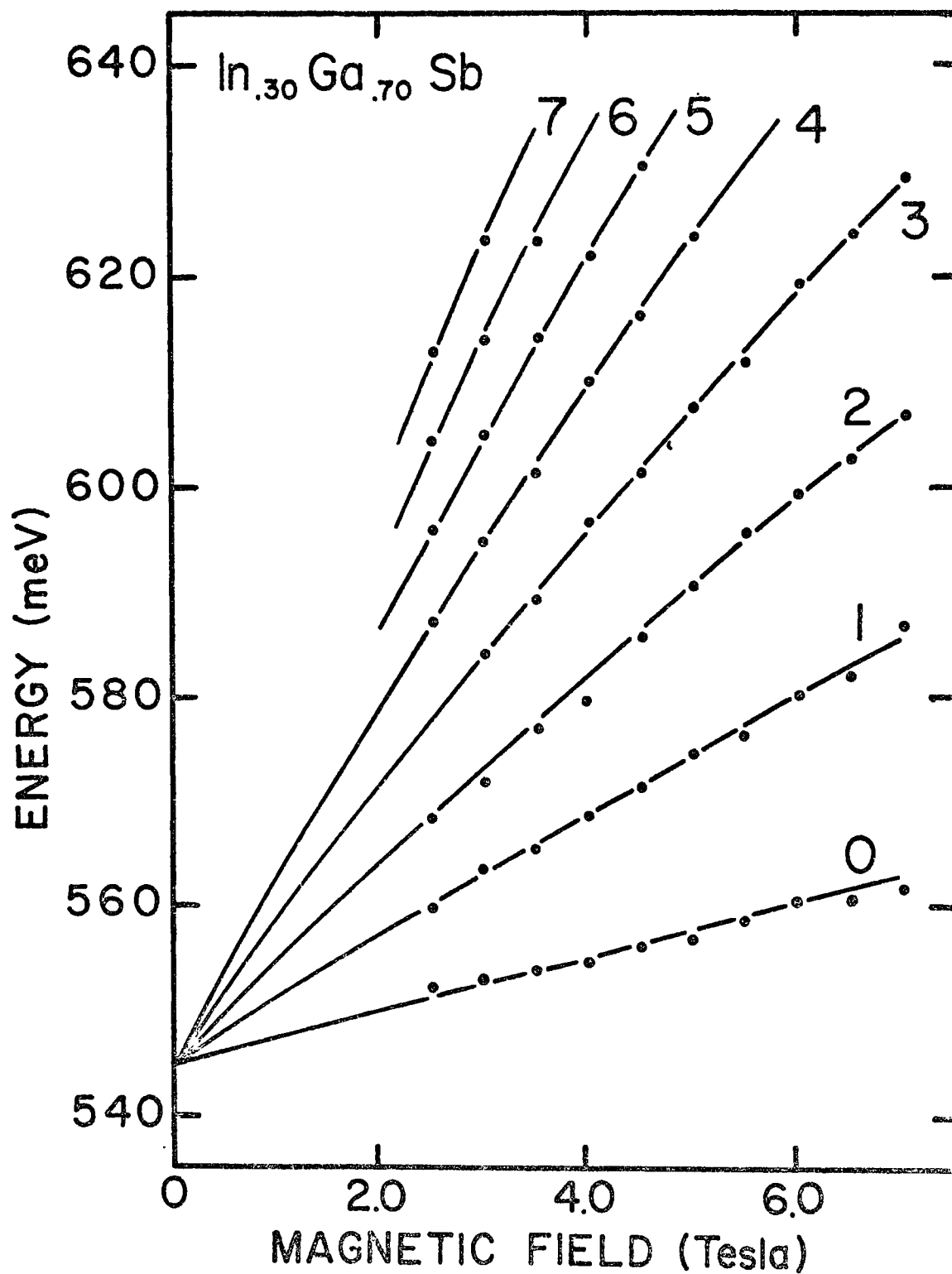
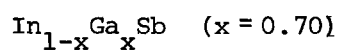


Figure 25/11(700)

Diagramme des énergies de transition en fonction du champ magnétique dans



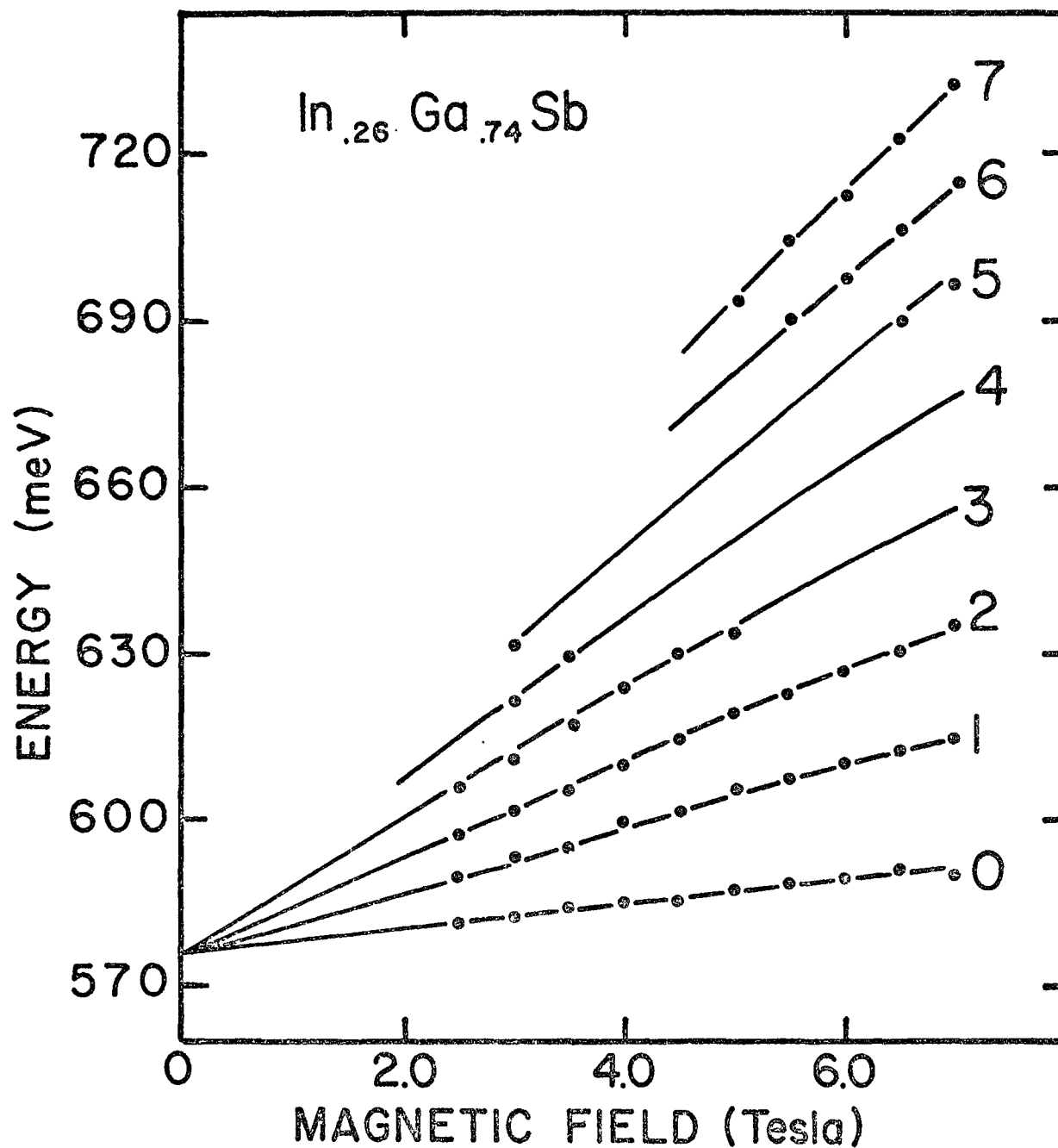
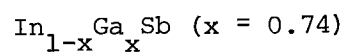


Figure 25/12(740)

Diagramme des énergies de transition en fonction du champ magnétique dans



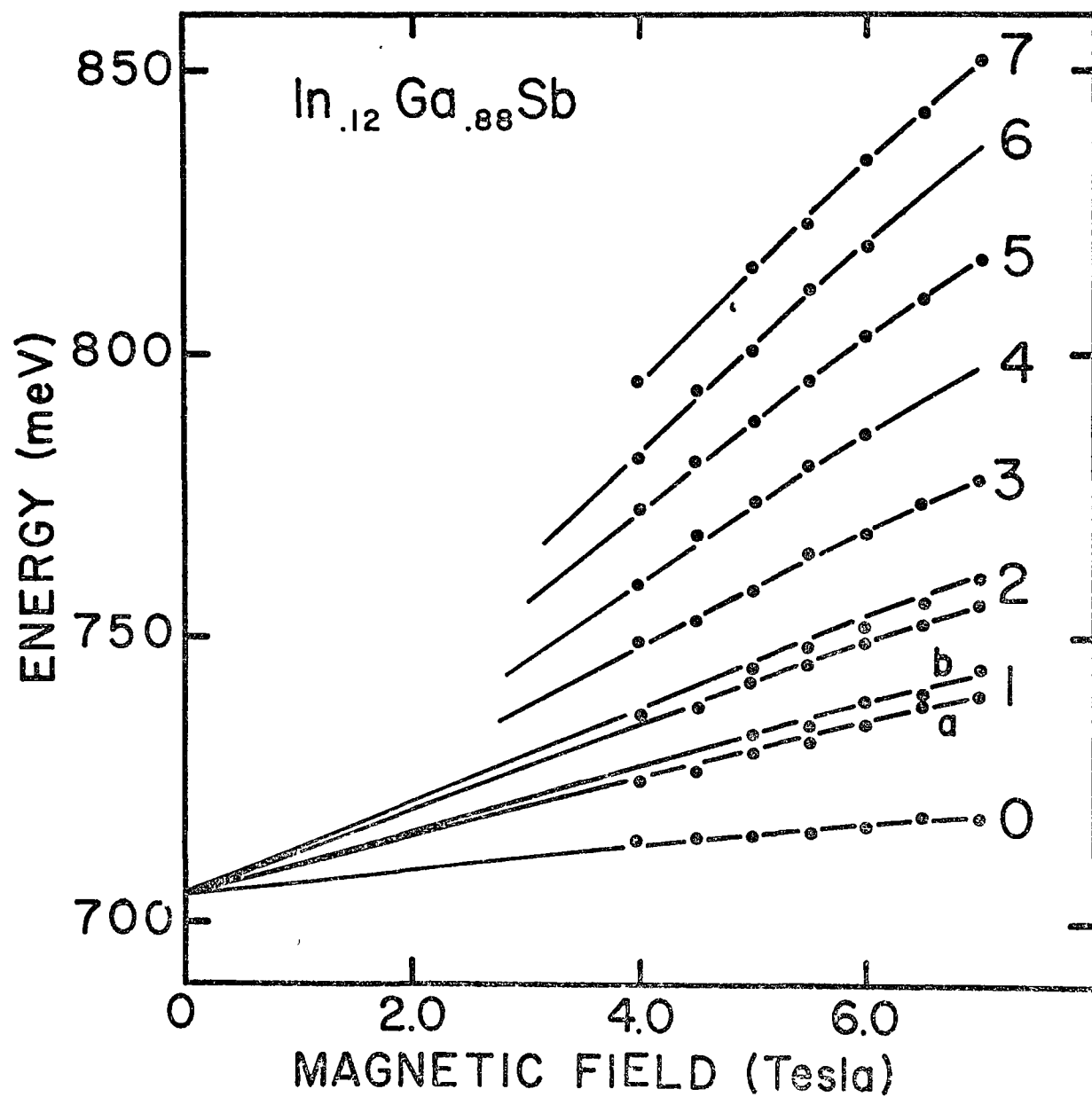
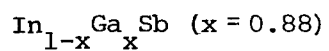


Figure 25/13(880)

Diagramme des énergies de transition en fonction du champ magnétique dans



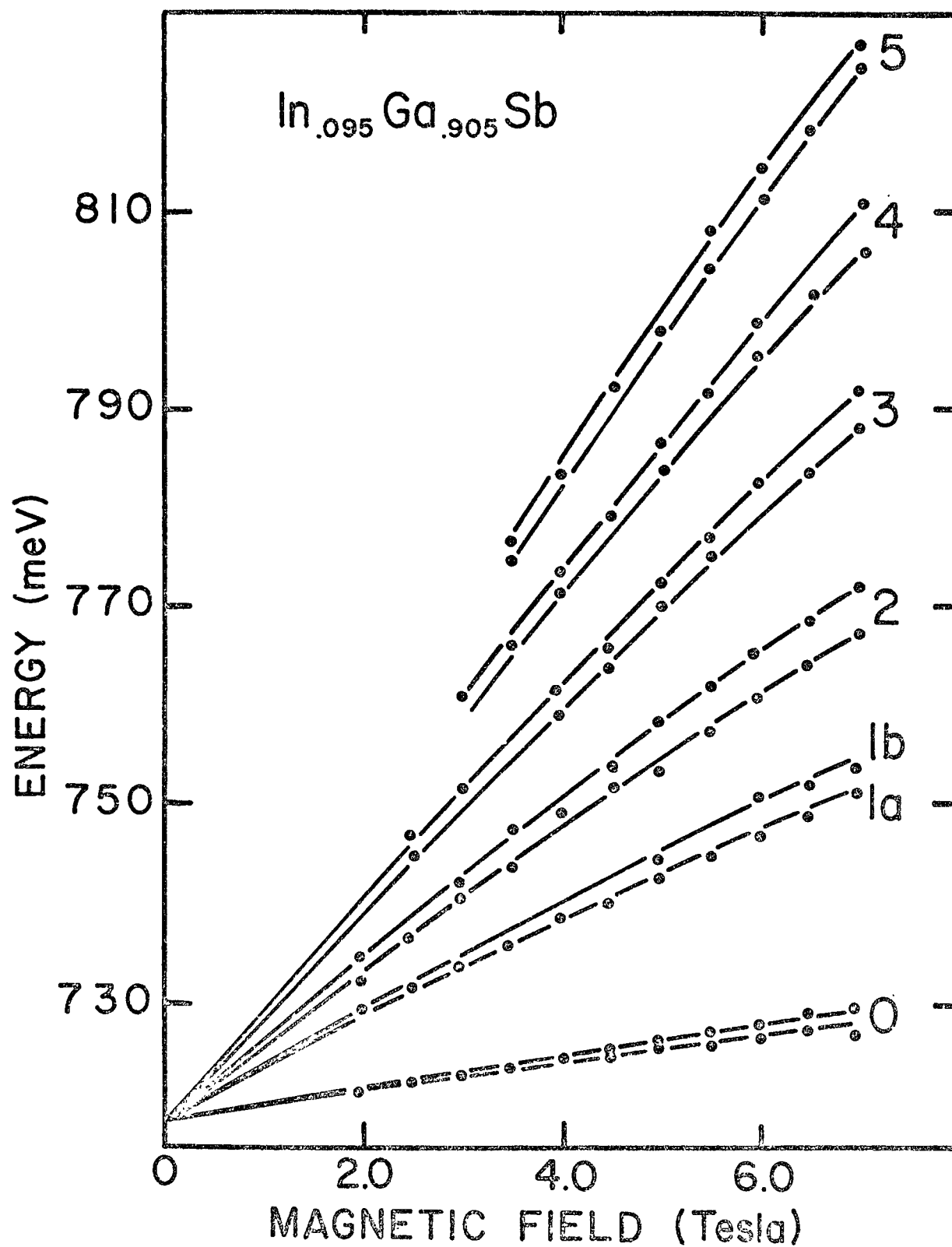


Figure 25/14(905)

Diagramme des énergies de transition en fonction du champ magnétique dans $\text{In}_{0.095}\text{Ga}_{0.905}\text{Sb}$ ($x = 0.905$)

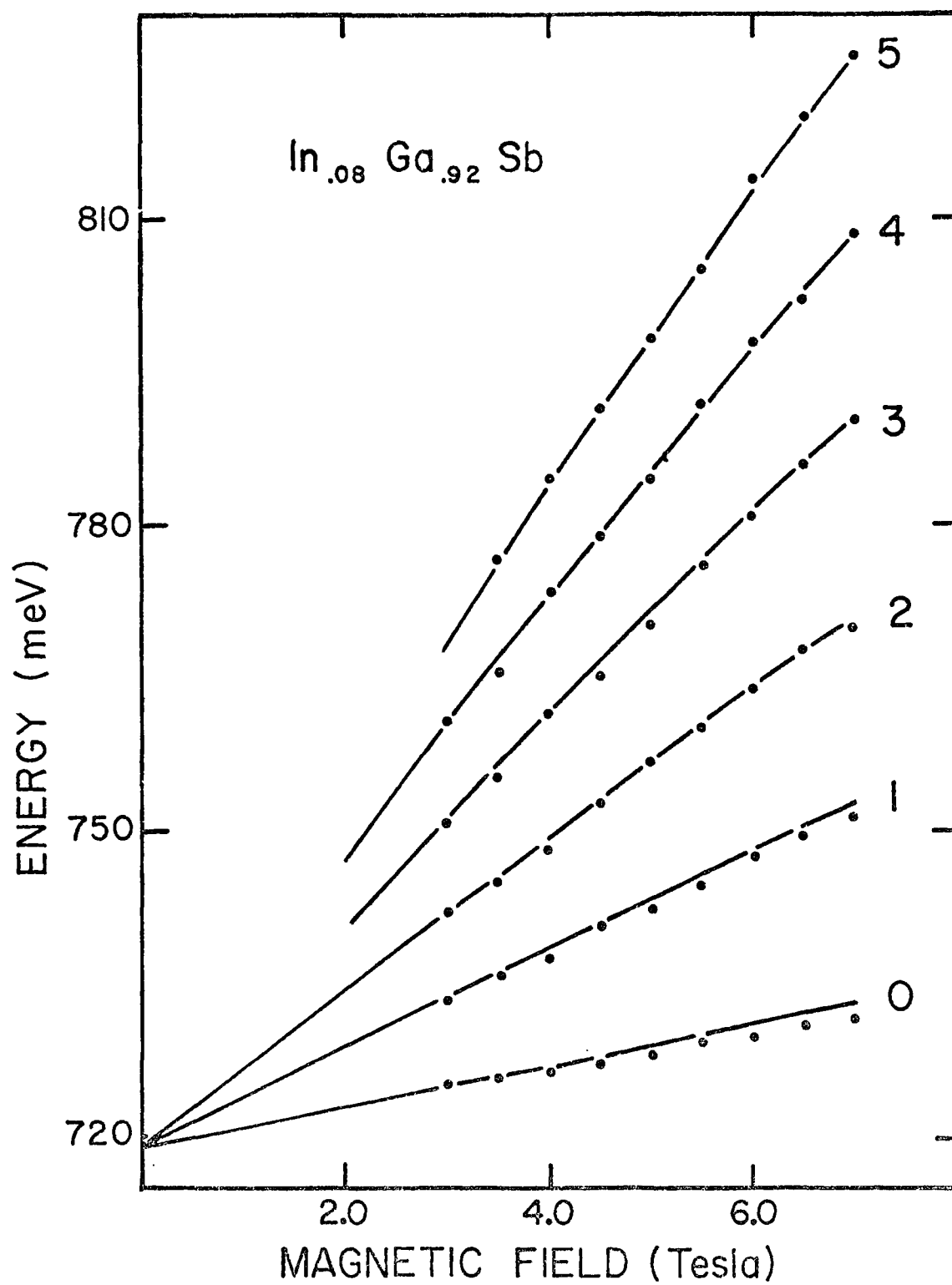


Figure 25/15(920)

Diagramme des énergies de transition en fonction du champ magnétique dans

$\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ ($x = 0.920$)

TABLEAU IV 1

Identification des transitions observées dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$
 (Figures 25/i(x)). $a^-(b^-)$ tous lourds, $a^+(b^+)$ trous légers
 $\alpha(\beta)$ bande de conduction

25/i(x)	# sur la Figure	Transition
1 (0)	0	$b^+(-1) \rightarrow \beta(0)$; $b^-(-1) \rightarrow \beta(0)$
	1 a	$a^+(1) \rightarrow \alpha(0)$; HH(2,1)
	1 b	$a^+(0) \rightarrow \alpha(1)$; $b^+(0) \rightarrow \beta(1)$
	2	HH(3,1,2)
	3	HH(4,2,3) ; $a^+(2) \rightarrow \alpha(1)$
	$m > 3$	HH(m+1, m-1, m)
2 (25)	0	$b^+(-1) \rightarrow \beta(0)$; $b^-(-1) \rightarrow \beta(0)$
	1	HH(2,1) ; $a^+(1) \rightarrow \alpha(0)$
	2	HH(3,1,2)
	3	HH(4,2,3) ; $a^+(2) \rightarrow \alpha(0)$
	$m > 3$	HH(m+1, m-1, m)
3 (50)	0	$b^+(-1) \rightarrow \beta(0)$; $b^-(-1) \rightarrow \beta(0)$
	1	HH(2,1) ; $a^+(1) \rightarrow \alpha(0)$
	$m \geq 2$	HH(m+1, m-1, m)
4 (85)	0 a	$a^-(1) \rightarrow \alpha(0)$; $a^+(-1) \rightarrow \alpha(0)$
	0 b	$b^-(-1) \rightarrow \beta(0)$; $b^+(-1) \rightarrow \beta(0)$
	1 a	$a^+(1) \rightarrow \alpha(0)$
	1 b	HH(2,1)
	$m \geq 2$	HH(m+1, m-1, m)
5 (130)	0	$b^+(-1) \rightarrow \beta(0)$; $b^-(-1) \rightarrow \beta(0)$
	1	HH(2,1) ; $a^+(1) \rightarrow \alpha(0)$
	$m \geq 2$	HH(m+1, m-1, m)

6(270)	0 a	$a^+(-1) \rightarrow \alpha(0) ; a^-(-1) \rightarrow \alpha(0)$
	0 b	$b^+(-1) \rightarrow \beta(0) ; b^-(-1) \rightarrow \beta(0)$
	1	$HH(2,1) ; a^+(1) \rightarrow \alpha(0)$
	2	$HH(3,1,2) ; b^+(1) \rightarrow \beta(0)$
	$m \geq 3$	$HH(m+1, m-1, m)$
7(330)	0	$b^+(-1) \rightarrow \beta(0) ; b^-(-1) \rightarrow \beta(0)$
	1	$HH(2,1) ; a^+(1) \rightarrow \alpha(0)$
	2	$HH(3,1,2) ; b^+(1) \rightarrow \beta(0)$
	$m \geq 3$	$HH(m+1, m-1, m)$
8(420)	0	$b^+(-1) \rightarrow \beta(0) ; b^-(-1) \rightarrow \beta(0)$
	1 a	$a^+(1) \rightarrow \alpha(0) ; HH(2,1)$
	1 b	$a^+(0) \rightarrow \alpha(1) ; b^+(0) \rightarrow \beta(1)$
	$m \geq 2$	$HH(m+1, m-1, m)$
9(620)	0	$b^+(-1) \rightarrow \beta(0) ; b^-(-1) \rightarrow \beta(0)$
	1	$HH(2,1)$
	$m \geq 2$	$HH(m+1, m-1, m)$
10(670)	0	$b^+(-1) \rightarrow \beta(0) ; b^-(-1) \rightarrow \beta(0)$
	1 a	$HH(2,1)$
	1 b	$a^+(1) \rightarrow \alpha(0) ; a^+(0) \rightarrow \alpha(1) ; b^+(0) \rightarrow \beta(1)$
	2	$HH(1,2) ; HH(3,2)$
	$m \geq 3$	$HH(m+1, m-1, m)$
11(700)	0	$b^+(-1) \rightarrow \beta(0) ; b^-(-1) \rightarrow \beta(0)$
	1	$HH(2,1) ; a^+(1) \rightarrow \alpha(0)$
	$m \geq 2$	$HH(m+1, m-1, m)$
12(740)	0	$b^+(-1) \rightarrow \beta(0) ; b^-(-1) \rightarrow \beta(0)$
	1	$HH(2,1) ; a^+(1) \rightarrow \alpha(0)$
	$m \geq 2$	$HH(m+1, m-1, m)$

13(880)	0	$b^+(-1) \rightarrow \beta(0) ; b^-(-1) \rightarrow \beta(0)$
	1a	$HH(2,1) ; a^+(1) \rightarrow \alpha(0)$
	1b	$a^+(0) \rightarrow \alpha(1) ; b^+(0) \rightarrow \beta(1)$
	2	$HH(1,2) ; HH(3,2)$
	$n \geq 3$	$HH(n+1, n-1, n)$
14(905)	0	$a^+(-1) \rightarrow d(0) ; a^-(-1) \rightarrow d(0)$
	1a	$HH(2,1)$
	1b	$a^+(1) \rightarrow \alpha(0) ; a^+(0) \rightarrow \alpha(1) ; b^+(0) \rightarrow \beta(1)$
	$n \geq 2$	$HH(n-1, n) ; HH(n+1, n)$
15(920)	0	$b^+(-1) \rightarrow \beta(0) ; b^-(-1) \rightarrow \beta(0)$
	1	$HH(2,1) ; a^+(1) \rightarrow \alpha(0)$
	$n \geq 2$	$HH(n+1, n-1, n)$

$$HH(n, n') = \frac{[a^-(n) \rightarrow \alpha(n')] + [b^-(n) \rightarrow \beta(n')]}{2}$$

$$HH(n', n'', n) = \frac{HH(n', n) + HH(n'', n)}{2}$$

courbes théoriques ont été calculées avec le modèle du chapitre I dans lequel les paramètres de bande ont été ajustés afin d'obtenir le meilleur accord possible avec les énergies expérimentales. L'accord général est bon, sauf pour quelques points des premières transitions et pour quelques autres à plus haute énergie. Pour ce qui concerne les premières transitions ($n < 2$ sur les figures 25/i(x)) ce désaccord n'est pas surprenant puisque nous n'avons pas inclus d'effets excitoniques dans nos calculs. Dans le cas des points à plus haute énergie le désaccord provient d'une mauvaise mesure expérimentale due à la présence de bandes d'absorption parasites (H_2O et CO_2 principalement) qui n'ont pas pu être complètement éliminées. Ces derniers points sont néanmoins inclus dans l'analyse numérique.

III. Analyse des énergies de transition

On commence cette analyse par l'identification des transitions observées. Pour cela on débute par InSb dont le diagramme (25/l(0)) est identifié par comparaison avec les résultats obtenus sur des monocristaux [P66, R077]. On étudie alors l'échantillon suivant ($x = 0.025$) et les énergies observées sont identifiées par comparaison avec celles de InSb. On procède ainsi de proche en proche à travers l'alliage. Chaque échantillon est alors analysé individuellement à l'aide du modèle de bandes couplées développé au chapitre I.

Les paramètres à déterminer sont les suivants:

- a) E_0 , la largeur de bande interdite (gap) au point Γ . Elle est obtenue directement par la convergence des points expérimentaux ($n \geq 2$) à champ nul.
- b) Δ_0 , la séparation spin-orbite (31 chap I). Elle n'est pas déterminée directement puisque nous n'avons pas observés de transitions à partir des niveaux de la bande Γ_7 (figure 1 chap I).

- c) E_p , le paramètre d'interaction entre la bande de valence et la bande de conduction. (31 et 48 chap. I).
- d) F , le paramètre d'interaction entre la bande de conduction et les autres bandes. (30a chap. I).
- e) $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ les paramètres modifiés de Luttinger (33 chap. I) qui représentent l'interaction des bandes de valences avec les bandes autres que la bande de conduction. On peut aussi bien déterminer γ_1^L, γ_2^L et γ_3^L les paramètres de Luttinger qui sont reliés de façon simple aux γ ; [Voir relation 48 chap. I et Annexe A].

Tous ces paramètres ont déjà été obtenus par plusieurs auteurs dans InSb et GaSb [P66, P67, R72, FI73, RO77 et références citées dans A72].

Seules les matrices H'_{oa}^{44} et H'_{ob}^{44} (38, 39 tableau I 3) sont utilisées pour calculer les énergies de transition. L'anisotropie est alors décrite par la fonction $f(\theta, \phi)$ (34 chap. I), et, suivant la méthode d'analyse choisie plus tôt (chap. I, IV B) nous remplaçons dans ces deux matrices la fonction $f(\theta, \phi)$ par sa valeur moyenne calculée sur l'angle solide Ω estimé pour chaque échantillon à l'aide des photographies de réflexion de Laue (Voir chap. II, I A).

Il y a donc 6 paramètres à déterminer en comparant les énergies calculées aux valeurs mesurées. Les études de convergences numériques avec un trop grand nombre de paramètres ajustables sont assez hasardeuses pour qu'il soit nécessaire d'étudier d'abord l'importance de l'influence de chacun d'eux dans le calcul numérique. Nous avons utilisé pour cette étude les équations approximatives qui donnent l'énergie des niveaux de Landau dans les bandes qui nous intéressent (45, 46, 47 chap I). Nous

avons calculé les dérivées de ces équations par rapport aux divers paramètres pour ensuite évaluer numériquement l'effet de chacun d'entre eux sur les énergies de transition. Cette étude préliminaire a l'avantage de réduire le temps de calcul à l'ordinateur en permettant de contrôler la variation des paramètres. Nous avons pu ainsi établir que les paramètres les plus influents sur les transitions à partir des niveaux de trous lourds étaient E_p , γ_1^L et γ_2^L , étant entendu que la variation de γ_3^L suit celle de γ_2^L de sorte que $\gamma_3^L - \gamma_2^L$ reste constant. Δ_0 et F ont une très faible influence sur les transitions de trous lourds, celles qui sont le plus souvent observées. Dans un premier temps, on donne à $\gamma_3^L - \gamma_2^L$, Δ_0 et F des valeurs fixes et l'on fait varier E_p , γ_1^L et γ_2^L pour faire converger les énergies théoriques vers les valeurs expérimentales. Une fois un accord raisonnable atteint on introduit $\gamma_3^L - \gamma_2^L$, Δ_0 et F dans le calcul de convergence qui minimise la déviation standard entre l'ensemble des valeurs calculées et des valeurs expérimentales. Lorsque la déviation minimum est obtenue on peut estimer la précision sur chaque paramètre. Pour cela nous avons cherché de quelle quantité maximum chacun d'eux pouvait varier sans augmenter la déviation de plus de 1%. La faible influence de Δ_0 et F dans le calcul de convergence est donc reflétée par un pourcentage d'incertitude relativement important ($\approx 20\%$ en moyenne) sur leur valeur. Pour obtenir une meilleure précision sur Δ_0 il aurait fallu pouvoir observer des transitions à partir des niveaux de la bande Γ_7 . Certains de nos échantillons donnant un bon signal photovoltaïque jusque dans la région d'énergie dans laquelle ces transitions auraient dûes être observées, nous avons essayé de les mettre en évidence mais nous n'avons obtenu aucun résultat. Il est probable que cet échec est dû à la faible intensité de ces transitions comparée à celles

entre Γ_8 et Γ_6 . Pour ce qui concerne F, on peut montrer qu'il influence plutôt les énergies des transitions à partir niveaux de trous légers [R70]. Les seules transitions de ce type que nous ayons observé sont surtout celles de plus basse énergie ($n < 2$ sur les figures 25/i(x)). Nous n'avons pas essayé d'améliorer la précision sur F en incluant ces transitions dans le calcul de convergence car ce sont elles qui sont le plus susceptibles d'être influencées par les excitons.

IV. Test de la méthode d'analyse et paramètres de bandes de $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$

Les mesures que nous avons faites sur InSb polycristallin avaient pour but de tester la méthode d'analyse proposée au chapitre I pour les polycristaux avant de l'appliquer au reste de l'alliage $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$. Nous avons groupé dans le tableau IV 2 les résultats obtenus à partir de monocristaux par d'autres auteurs et, en dernière colonne de ce tableau, les paramètres déduits de l'analyse des spectres photovoltaïques réalisés avec InSb polycristallin. Pour compléter la comparaison nous avons indiqué, en plus des paramètres obtenus directement, la masse efficace des électrons de la bande de conduction m_c et le quatrième paramètre de Luttinger κ^L [L56, 33 chap. I] que l'on peut calculer avec les relations suivantes [Voir Annexe A].

$$\frac{1}{m_c} = \frac{E_p}{3} \left(\frac{2}{E_0} + \frac{1}{E_0 + \Delta_0} \right) + 1 + 2F \quad (1)$$

$$\kappa^L = \gamma_3^L - \frac{\gamma_1^L}{3} + \frac{\gamma_2^L}{3} - \frac{2}{3} \quad (2)$$

Nous avons gardé Δ_0 fixe dans l'analyse en utilisant la meilleure valeur expérimentale publiée [P67]. Paul Rochon [R077] a montré que l'ensemble

TABLEAU IV 2

Paramètres de InSb

Référence	Z61	P67	P66, R077	Nos résultats
E_0 (meV)	235.7	236.6	235.5	235.5 ± .5
Δ_0 (meV)		810	900	810
E_p (eV)		21.21	21.92	21.55 ± .5
F		0.0	0.0	0.0 ± .15
$\frac{m_c}{m_0}$	0.0145	0.0145	0.0145	0.0145 ± .0003
γ_1^L	36.0	33.51	32.5	32.4 ± .1
γ_2^L	14.5	14.48	14.3	14.3 ± .05
γ_3^L	16.2	15.65	15.4	15.4 ± .05
κ^L	13.2	13.47	13.4	13.5 ± .1

des paramètres de Pidgeon et al [P66, P67, P69] sont ceux qui représentent le mieux à la fois les transitions entre niveaux de Landau et déplacement des excitons avec le champ magnétique dans InSb monocristallin. L'accord de nos résultats avec ces paramètres est bon et nous avons donc décidé d'utiliser la méthode d'analyse ainsi testée pour étudier le reste de l'alliage. Chaque échantillon étudié est donc analysé suivant la même méthode, ce qui a permis d'obtenir les paramètres groupés sur le tableau IV 3. Les erreurs expérimentales seront indiquées sur les courbes présentées au cours du chapitre suivant. On peut, à partir des valeurs expérimentales des paramètres et en tenant compte de l'incertitude sur ces valeurs, chercher les courbes qui représentent le mieux la variation de chaque paramètre en fonction de la composition. On obtient alors les équations suivantes:

$$\begin{aligned}
 E_0(x) &= .235 + .165 x + .413 x^2 \\
 \Delta_0(x) &= .810 - .147 x + .089 x^2 \\
 E_P(x) &= 21.56 - 1.83 x + 4.6 x^2 \\
 F(x) &= -0.003 - 2.14 x + 0.85 x^2 \\
 \gamma_1^L &= 32.24 - 22.91 x + 4.96 x^2 \\
 \gamma_2^L &= 14.19 - 11.50 x + 2.50 x^2 \\
 \gamma_3^L &= 15.26 - 11.13 x + 2.36 x^2
 \end{aligned} \tag{3}$$

Nous allons étudier la variation de ces paramètres en fonction de la composition dans le chapitre suivant et nous comparerons nos résultats avec ceux prédits par diverses théories ou obtenus par d'autres méthodes expérimentales.

T A B L E A U I V 3

PARAMETRES DE BANDES DE $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$

Composition	E_o (mev)	Δ_o (mev)	E_p (ev)	F	γ_1^L	γ_2^L	γ_3^L
0.00	235	810	21.54	0.0	32.4	14.3	15.4
0.025	241	805	21.46	-0.04	31.69	13.9	15.0
0.05	247.5	805	21.58	-0.08	30.57	13.4	14.4
0.085	256	790	21.59	-0.2	30.50	13.31	14.41
0.13	268.5	790	21.39	-0.3	29.63	12.85	14.0
0.27	318	775	21.44	-0.6	26.32	11.21	12.36
0.33	345	770	21.43	-0.6	24.97	10.54	11.69
0.42	386	760	22.03	-0.8	23.60	9.82	11.05
0.62	490	760	21.63	-0.8	19.71	7.92	9.12
0.67	526.5	755	22.20	-1.05	19.50	7.78	9.04
0.70	545	750	22.66	-1.15	18.80	7.44	8.69
0.74	575	745	22.71	-1.15	18.31	7.20	8.45
0.88	705	750	24.16	-1.25	15.87	5.97	7.27
0.905	718	755	23.56	-1.25	15.63	5.85	7.15
0.92	719	755	23.53	-1.25	15.20	5.64	6.94

C H A P I T R E V

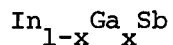
VARIATION DES PARAMETRES DE BANDES DANS $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$

- I. Etudes théoriques de $E_0(x)$ et $\Delta_0(x)$
 - A- Variation de $E_0(x)$
 - B- Variation de $\Delta_0(x)$
- II. Variation expérimentale de $E_0(x)$ et $\Delta_0(x)$ dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$
- III. Masse efficace de la bande conduction (m_c)
 - A- Méthode $\vec{k} \cdot \vec{p}$
 - B- Mesures expérimentales de m_c et corrections du modèle $\vec{k} \cdot \vec{p}$
 - C- Variation de F et E_p dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$
 - D- Variation de m_c calculée dans le modèle de bandes couplées
- IV. Facteur de Landé de la bande conduction (g_c)
- V. Paramètres de Luttinger et masses efficaces de la bande de valence

It is shown that the measured values of E_0 , Δ_0 , E_p , F and the γ -parameters in $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ can be used directly to calculate the effective masses and g_c throughout the alloy range. Interband mixing caused by alloy disorder leads to a non linear variation of all the band parameters.

C H A P I T R E V

VARIATION DES PARAMETRES DE BANDES DANS



Nous avons donc, au cours des chapitres précédents, mis au point une méthode qui nous a permis d'obtenir les principaux paramètres de bandes de $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$. Nous allons maintenant étudier la variation de ces paramètres à travers l'alliage. Certains ont déjà fait l'objet de recherches expérimentales et théoriques et nous rappellerons brièvement les résultats publiés que nous comparerons à ceux que nous avons obtenus.

I. Etudes théoriques de $E_0(x)$ et $\Delta_0(x)$

Lorsqu'on élabore un alliage de type $(\text{AC})_x(\text{BC})_{1-x}$ dont les éléments constitutifs AC et BC sont des semiconducteurs III-V, le solide cristallise sous forme cubique à faces centrées avec une structure zinc-blende. On sait que cette structure est formée d'un ensemble de deux réseaux cubiques identiques déplacés l'un par rapport à l'autre d'un vecteur $(\frac{a}{4}, \frac{a}{4}, \frac{a}{4})$ où a est le paramètre du réseau. Les atomes de type C se répartissent sur l'un des réseaux, les atomes A et B se répartissent de façon aléatoire sur le second. Ce type d'alliage que l'on appelle parfois pseudo-binaire [W62] a donné lieu à de nombreuses études expérimentales et théoriques [W62, MA64, Voir aussi par exemple les références citées dans C78].

Du côté expérimental, les deux points les plus importants sont les suivants:

(a) Dans la plupart des cas, la variation des paramètres E_0, Δ_0, m_c est non linéaire [Voir références dans V70, V72, BE73]. La même remarque s'applique aussi à des énergies comme Δ_1 par exemple [BE73] dont nous ne

parlerons pas car elles n'ont pas été déterminées dans ce travail.

(b) Les structures observées, par exemple celles dues aux transitions E_0 ou $E_0 + \Delta_0$, ne sont pas notablement plus larges dans les alliages que dans les composés binaires [AL72, M75]. Les modèles théoriques ont donc essayé de rendre compte de ces deux observations. La difficulté principale, du point de vue théorique, vient de l'existence du désordre dû à la distribution aléatoire des atomes de type A et B sur le réseau cristallin. Il semble, au premier abord, que ce désordre permet d'expliquer la non linéarité des variations mais qu'il devrait entraîner un élargissement des structures [P55]. C'est à partir de cette contradiction avec l'évidence expérimentale que certains auteurs ont proposé un modèle négligeant le désordre mais expliquant la forme de la variation des paramètres E_0 et Δ_0 [H74]. Un travail récent [C78] montre que le désordre peut être la cause de la variation non linéaire des paramètres tout en ne créant aucun élargissement notable des structures. Nous allons rappeler brièvement les arguments des différents auteurs.

A- Variation de $E_0(x)$

Une approche naturelle du problème est celle de l'approximation du cristal virtuel (VCA). Dans cette approximation le potentiel dû aux atomes A et B est séparé en deux parties, l'une périodique et l'autre apériodique [P55].

$$v_{\text{per}}(\vec{r}) = x v_A(\vec{r}) + (1-x) v_B(\vec{r}) \quad (1)$$

$$v_{\text{aper}}(\vec{r}) = v_{A,B}(\vec{r}) - v_{\text{per}}(\vec{r}) \quad (2)$$

où $v_{A,B}(\vec{r}) = v_A(\vec{r})$ si la position définie par $\vec{r}$ est occupée par un atome

A et $V_{A,B}(\vec{r}) = V_B(\vec{r})$ si cette position est occupée par un atome B. On néglige $V_{\text{aper}}(\vec{r})$ et le problème peut être étudié par les méthodes standard de calcul de bandes puisque le potentiel restant est périodique. Il faut remarquer que même avec cette approximation la variation du gap E_0 en fonction de la composition x n'est pas linéaire parce que dans aucune méthode standard de calcul de bandes E_0 n'est une fonction linéaire du potentiel [V70]. Il a été observé expérimentalement que $E_0(x)$ variait de façon quadratique:

$$E_0(x) = a + bx + cx^2 \quad (3)$$

Le paramètre c est appelé paramètre de courbure (bowing). Van Vechten et Bergstresser [V70] ont utilisé la Méthode Diélectrique (DM) [PH69, V69] dans la VCA pour calculer la variation de $E_0(x)$ dans divers alliages. Ces auteurs montrent que le paramètre de courbure intrinsèque c_i calculé avec la simple VCA avec un potentiel moyen, est nettement inférieur dans la plupart des cas à la valeur expérimentale de c . Ils introduisent alors l'effet du désordre par l'intermédiaire d'une fluctuation moyenne du potentiel que l'on peut écrire:

$$c_{AB} = b e^2 Z \left| \frac{1}{r_A} - \frac{1}{r_B} \right| e^{-k_s R} \quad (4)$$

où Z est le nombre de valence ($= Z_A = Z_B$) et $R = \frac{1}{2} [r_C + (1-x)r_B + x r_A]$

où r_A , r_B et r_C sont les rayons des atomes A, B et C et k_s est le nombre d'onde d'écran de Thomas-Fermi; b est un paramètre ajustable qui permet de compenser les effets d'écrantage à courte distance qui sont trop grands.

Ils définissent alors le paramètre de courbure extrinsèque c_e :

$$c_e = \frac{c_{AB}^2}{K} \quad (5)$$

où K est un paramètre ajustable qui a la même valeur pour tous les alliages.

Le paramètre de courbure total est donc:

$$c = c_i + c_e \quad (6)$$

K est calculé pour que la valeur théorique de c de $\text{ZnS} - \text{Te}$ coïncide avec la valeur expérimentale. Cet alliage est celui dont la variation de $E_0(x)$ présente la plus grande non-linéarité. Notons que des résultats expérimentaux plus récents sur $\text{ZnS} - \text{Te}$ [H73] ont donné une valeur de K différente de celle calculée par Van Vechten et donc un ensemble différent de valeurs de c pour tous les alliages considérés [H74].

D'un autre côté, Hill [H74], en s'appuyant sur l'absence d'observation expérimentale d'élargissement, a suggéré l'utilisation d'un potentiel dans la VCA qui varie, indépendamment de tout effet de désordre, de façon non linéaire. Il obtient alors le paramètre de courbure:

$$c = \frac{ze \frac{r_A + r_B}{2}}{4\pi \epsilon_0} \left(\frac{1}{r_A} - \frac{1}{r_B} \right)^2 \exp \left(-\frac{1}{2} S \frac{a\sqrt{3}}{4} \right) \quad (7)$$

où S est une constante d'écran et a est le paramètre du réseau cristallin.

Les valeurs numériques de c calculées avec les relations (6) et (7) sont sensiblement les mêmes dans tous les alliages III-V [H74]. Plus récemment, Siggia [S74] et Chadi [C77] ont montré qu'il fallait tenir compte du désordre dans les alliages sans toutefois résoudre le problème posé par l'absence d'élargissement dans les structures expérimentales.

Chen et Sher [C78] ont appliqué l'approximation du potentiel cohérent (CPA) à l'étude de $E_0(x)$ et de la bande de valence dans les alliages III-V. Ils montrent, dans un calcul à une bande (les états d'énergie des atomes de type A et B forment une même bande) que le désordre dans l'alliage a

une contribution primordiale à la non-linéarité de $E_0(x)$ tout en ne créant qu'un très faible élargissement des structures interbandes. Ils montrent aussi que les modèles de Van Vechten [V70] et Hill [H74] sont deux approximations particulières de la CPA. Leurs calculs sont incomplets mais ils permettent de conclure que le désordre est la cause principale de la variation non linéaire de $E_0(x)$ et que ce désordre n'entraîne pas d'élargissement des structures expérimentales.

B. Variation de $\Delta_0(x)$

Ce même désordre permet aussi d'expliquer la courbure de $\Delta_0(x)$, mais jusqu'à présent seuls des modèles semi-empiriques ont été proposés. En suivant l'idée de Van Vechten, Berolo et al [V72, BE73] montrent que les variations expérimentales de Δ_0 dans les alliages où elles ont été mesurées peuvent être assez bien représentées par la relation suivante:

$$\Delta_0(x) = [1 - y(x)] \Delta_{ov}(x) \quad (8)$$

où $\Delta_{ov}(x)$ représente une interpolation linéaire de Δ_0 et $y(x)$ est donné par la relation

$$y(x) = x(1 - x) \frac{c_{AB}^2}{K \tilde{E}_{ov}(x)} \quad (9)$$

Cette correction $y(x)$ a pour but de tenir compte du mélange entre la bande de conduction (BC) et la bande de valence (BV) au point Γ . Berolo et al [BE73] expliquent que ce mélange est causé par le désordre d'alliage. Ce désordre crée aussi une interaction entre les bandes de valence et la bande "split-off" (SO) mais cet effet sur Δ_0 est faible comparé au premier [V72]. Deux expressions peuvent être employées pour le gap moyen $\tilde{E}_{ov}$:

$$(a) \quad \tilde{E}_{ov} = 3 \left[\frac{2}{E_{ov}} + \frac{1}{E_{ov} + \Delta_{ov}} \right]^{-1} \quad (10)$$

moyenne géométrique,

$$(b) \quad \tilde{E}_{ov} = E_{ov} + \frac{\Delta_{ov}}{3} \quad (11)$$

moyenne arithmétique.

On utilise l'une des deux moyennes suivant que dans le calcul de bandes l'interaction spin-orbite est traitée avant (moyenne géométrique) ou après (moyenne arithmétique) avoir inclus le mélange s-p. Lorsque E_0 est petit il est donc préférable d'employer la seconde moyenne [I74]. Dans les deux relations (10) et (11) E_{ov} est calculé suivant l'équation (3) avec $c = c_i$.

Chadi [C77] utilise la méthode des liaisons fortes (tight-binding) pour montrer que le désordre est à l'origine de la courbure de $\Delta_0(x)$. Il obtient un bon accord numérique avec les résultats expérimentaux non sans avoir ajusté de 15 à 20% la valeur du potentiel de perturbation mélangeant les états s et p.

II. Variation expérimentale de $E_0(x)$ et $\Delta_0(x)$ dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$

La variation de $E_0(x)$ dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ a été mesurée à diverses températures par plusieurs auteurs qui en ont déduit la valeur de c (équation 3). Nous avons regroupé ces résultats avec les valeurs théoriques dans le tableau V 1 pour les comparer au paramètre de courbure $c = 0.413$ que nous avons déduit de la courbe expérimentale de la figure 26. Les points expérimentaux sur cette figure sont tirés du tableau IV3 et leur dimension correspond à l'incertitude expérimentale (± 0.5 meV).

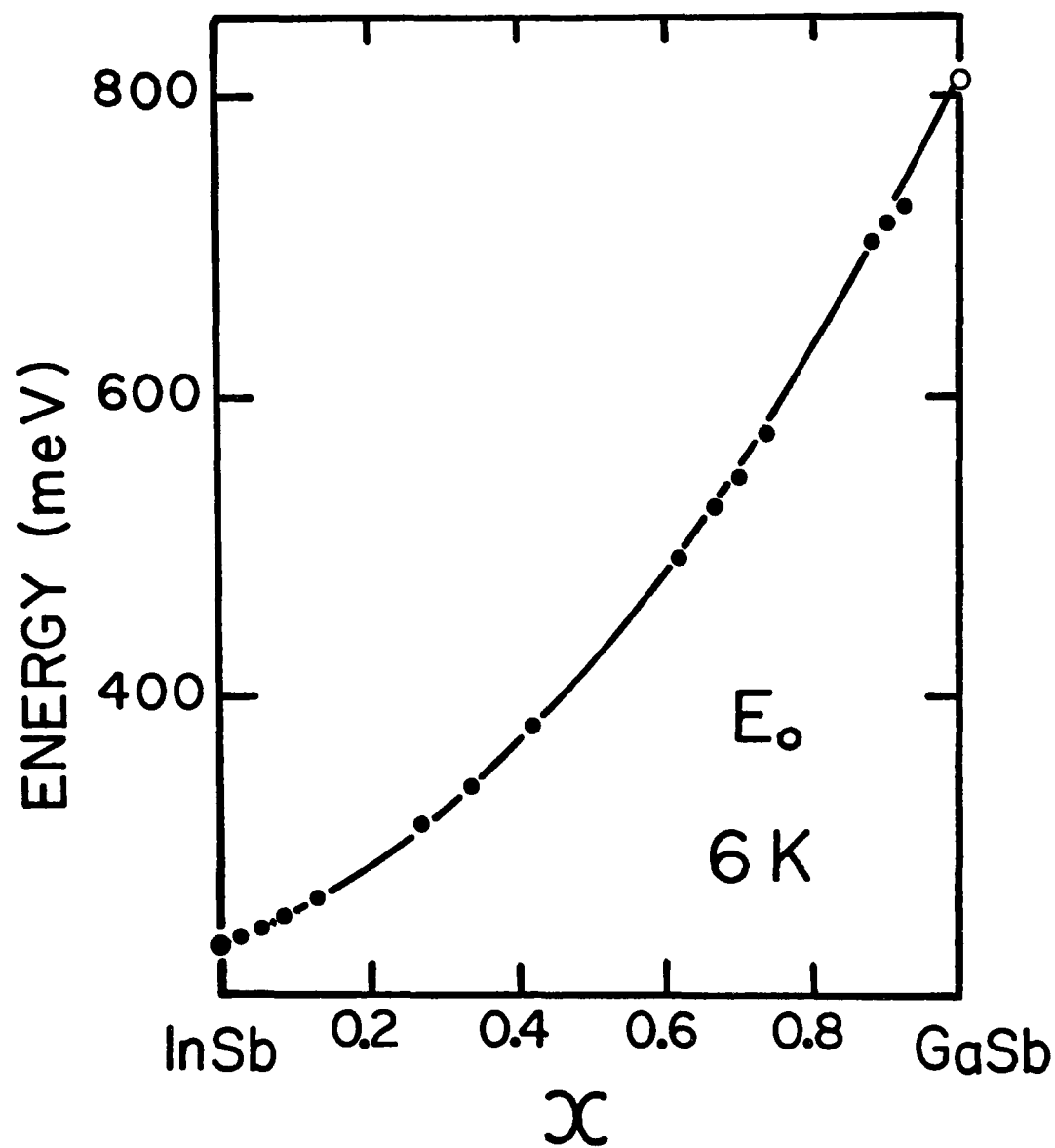


Figure 26

Variation de E_0 en fonction de la composition dans

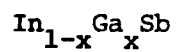


TABLEAU V 1

Paramètre de courbure de $E_0(x)$ dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$

Théorie		Expérience				
DM	VCA	(4.2 K)	(6 K)	(80-300 K)	(4.2 K)	(300 K)
0.36 ^(a)	0.41 ^(b)	0.33 ^(c)	0.413 ^(d)	0.415 ^(e)	0.42 ^(f)	0.43 ^(g)
0.42 ^(h)						

(a) Ref. V70 (eq. 6)

(b) Ref. H74 (eq. 7)

(c) Ref. A76

(d) Nos résultats

(e) Ref. A74

(f) calculé d'après W67

(g) Ref. W61

(h) calculé par Hill [H74] (eq. 6) en utilisant la méthode de Van Vechten [V70] d'après une mesure différente du paramètre K (eq. 5) [H73].

On note d'abord sur le tableau V1 que les deux modèles théoriques représentés par les équations (6) et (7) donnent des valeurs de c à peu près identiques pour $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$. Rappelons que ces valeurs sont calculées pour un solide à 0K. La variation de c avec la température n'a été étudiée que de 300 à 80K [A74] et c est constant dans cet intervalle, la même constance a été observée dans d'autres alliages [AL72, M75]. Nos mesures à 6K ont donné une valeur en excellent accord avec ces résultats. La valeur $c = 0.33$ [A76] a été déduite de mesures de photoluminescence, mais la complexité de la forme des raies observées rend l'analyse qui en est faite plutôt discutable.

Nous n'avons pas observé de transitions à partir des niveaux de Landau associé à la bande S.0 et donc comme nous l'avons expliqué dans le chapitre IV notre détermination de $\Delta_0(x)$ n'est pas très précise (Figure 27). Sur cette figure la courbe (b) représente la meilleure variation quadratique passant par les valeurs expérimentales et par les valeurs connues de Δ_0 dans InSb et GaSb [A72]. La courbe (a) est une interpolation linéaire entre ces deux valeurs, les courbes (c) et (d) ont été calculées avec le modèle de Berolo (équation 8) et les deux valeurs possibles de $\tilde{E}_{0v}$ (10 et 11). Nous n'avons pas essayé d'ajuster les paramètres du modèle de Berolo en fonction de notre résultat expérimental car cet ajustement n'aurait d'intérêt que si notre mesure était plus précise. La variation calculée par Hill [H74] avec son modèle négligeant le désordre donne une non linéarité nettement plus grande que celles des courbes de la figure 27. Dans le tableau V2 nous comparons les déviations entre les courbes b, c, d et a (Δ_{0v}) pour $x = 0.5$. Les seules mesures de Δ_0 dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ en dehors de la notre ont été faites à 80K [A74] et semblent n'indiquer aucune courbure de $\Delta_0(x)$.

Δ_0 est utilisé dans diverses équations pour calculer certains paramètres

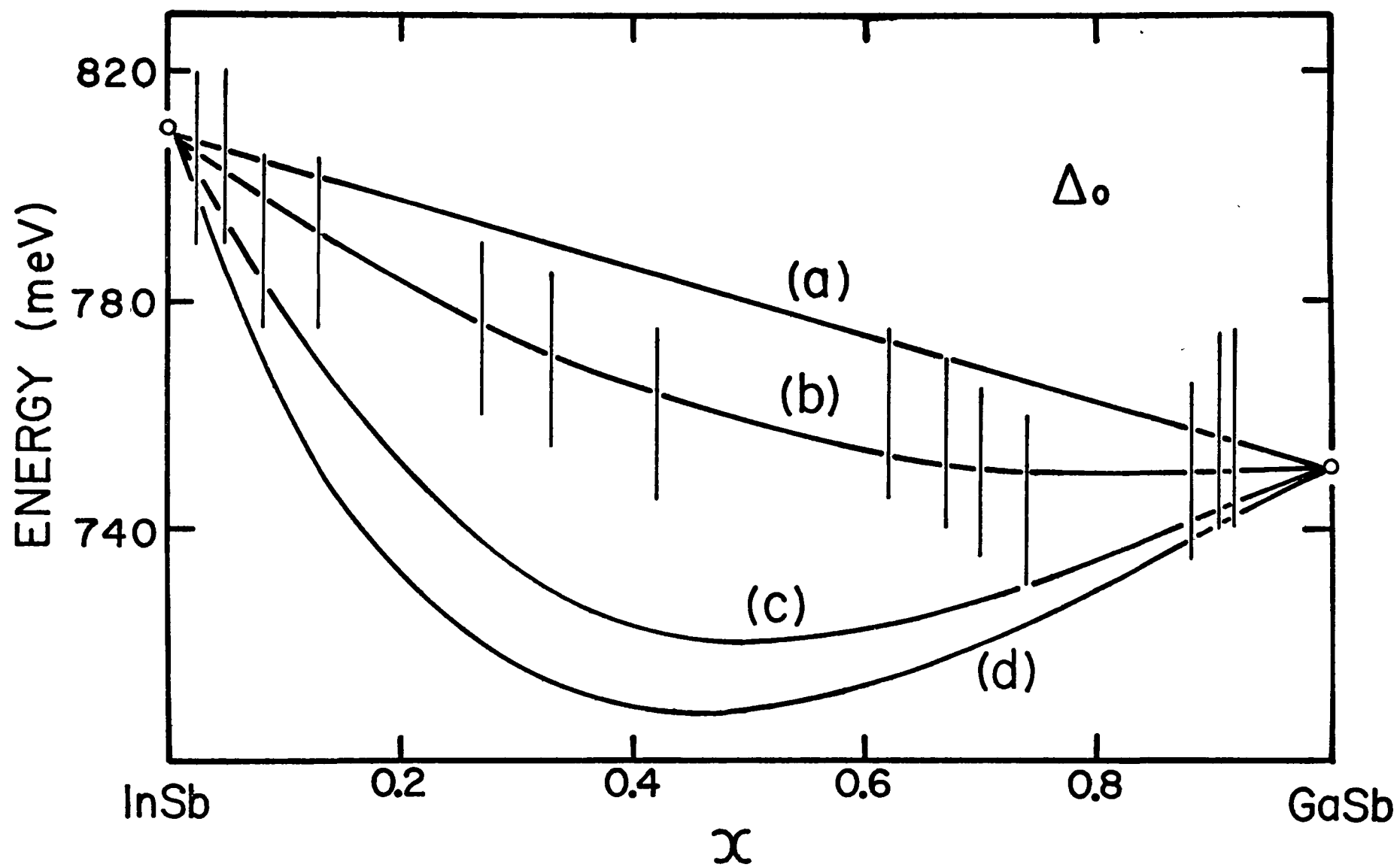


Figure 27

Variation de Δ_0 en fonction de la composition dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$

TABLEAU V 2

Différence à $x = 0.5$ entre Δ_{ov} (linéaire) et Δ_o

dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$

	Expérience		Théorie	
$\Delta_{ov} - \Delta_o$ (meV)	$< 15^{(a)}$	$24 \pm 15^{(b)}$	$60^{(c)}$	$73^{(d)}$

(a) Ref. A74

(b), (c), (d) courbes b, c, d de la figure 27

de bandes mais son influence est faible. Nous pourrions donc utiliser les valeurs expérimentales de Δ_0 que nous avons obtenues ici pour les calculs de m_c et g_c par exemple.

III. Masse efficace de la bande de conduction (m_c)

A- Méthode $\vec{k} \cdot \vec{p}$

Dans l'approximation $\vec{k} \cdot \vec{p}$, la masse efficace m_c est reliée au gap E_0 , à la séparation spin orbite Δ_0 et à divers paramètres d'interaction entre les bandes au point Γ [R59]. Selon le degré d'approximation utilisé, le nombre de paramètres qui entrent dans le calcul de m_c varie. Dans l'approximation à 3 bandes (CB, VB, SO) on néglige complètement l'interaction de CB avec des bandes autres que VB et SO. La masse m_c est donnée par la formule de Kane [K56].

$$\frac{1}{m_c} = 1 + \frac{E_p}{3} \left(\frac{2}{E_0} + \frac{1}{E_0 + \Delta_0} \right) \quad (12)$$

Dans l'approximation à 5 bandes on ajoute aux trois précédentes les deux bandes de conduction de symétrie p (Figure 28) Γ_7^c et Γ_8^c .

Si l'on néglige toutes les autres interactions on obtient m_c par la relation suivante:

$$\frac{1}{m_c} = 1 + \frac{E_p}{3} \left(\frac{2}{E_0} + \frac{1}{E_0 + \Delta_0} \right) - \frac{E'_p}{3} \left(\frac{2}{E(\Gamma_8^c) - E_0} + \frac{1}{E(\Gamma_7^c) - E_0} \right) \quad (13)$$

où E'_p représente l'énergie d'interaction entre les bandes de conduction

Γ_1^c et Γ_4^c (Figure 28).

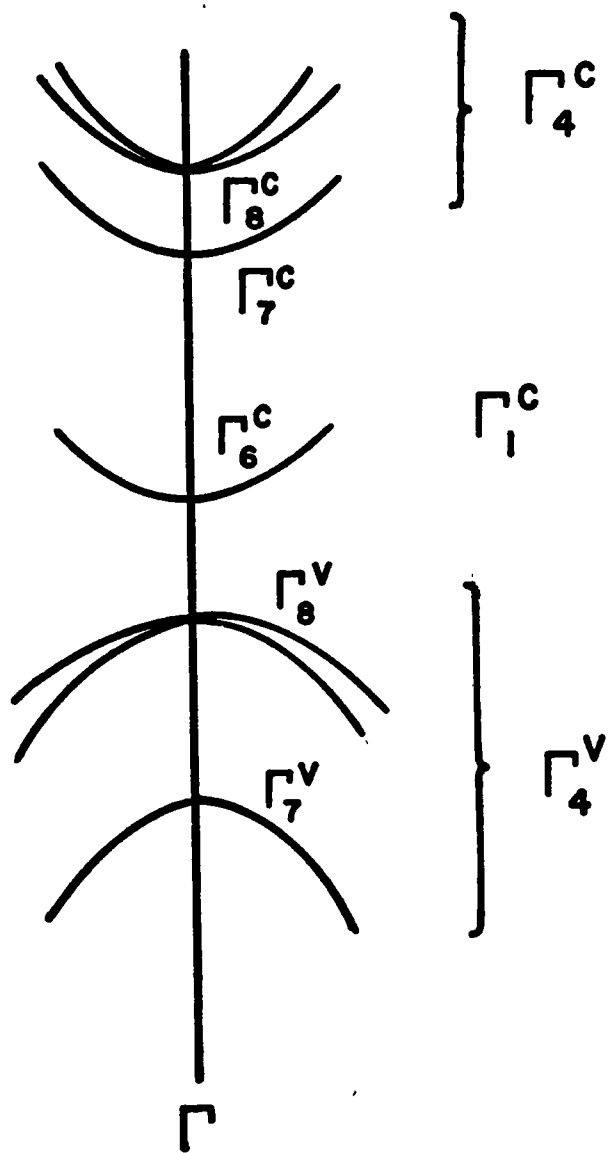


Figure 28

Schéma de bandes au point Γ pour un
semiconducteur III-V

Dans le modèle de bandes couplées que nous avons utilisé au long de ce travail, nous traitons exactement l'interaction $\Gamma_1^C - \Gamma_4^V$, mais les autres interactions, incluant celles décrites dans le modèle à 5 bandes, sont traitées sous forme de perturbation (Voir chapitre I). Dans ce cas la masse m_c s'écrit [A72]

$$\frac{1}{m_c} = 1 + \frac{E_P}{3} \left(\frac{2}{E_0} - \frac{1}{E_0 + \Delta_0} \right) + 2F \quad (14)$$

Le dernier terme a été défini au chapitre I:

$$F = \sum_{n,\ell} \frac{|\langle S | p_x | \Gamma_4(n,\ell) \rangle|^2}{E_0 - E_n}$$

où la sommation inclu tous les états Γ_4 excepté Γ_{4v} . Le dernier terme de (13) est donc englobé dans F. En réalité les bandes de symétrie Γ_4 assez proche de Γ_1 pour avoir une contribution notable à m_c (à cause du dénominateur dans l'expression de F) sont les bandes Γ_4^C de la figure 28.

B- Mesures expérimentales de m_c et corrections du modèle $\vec{k} \cdot \vec{p}$

Des mesures de m_c par différentes techniques (rotation Faraday, réflectivité infrarouge etc.) ont été faites sur de nombreux alliages III-V dont $In_{1-x}Ga_xSb$ [A69]. L'analyse de ces expériences nécessite toujours des corrections pour tenir compte entre autres de la température à laquelle les mesures ont été effectuées. Ce type de corrections, bien que clairement établi par Ehrenreich [E57], ne facilite pas la comparaison avec les valeurs calculées par la méthode $\vec{k} \cdot \vec{p}$. Néanmoins, il a été établi que les valeurs calculées par l'équation (12) en interpolant linéairement E_P étaient trop faibles dans tous les alliages où m_c a été mesurée à 300K. Berolo et al [BE73] ont donc proposé de modifier la relation (12) en faisant intervenir

le mélange au point Γ entre les diverses bandes (BC, BV et SO), ce mélange étant essentiellement causé par le désordre d'alliage. Cette correction semi-empirique à l'équation (12) inclue les effets des masses de trous lourds (m_{hh}) et légers (m_{lh}) ainsi que de la masse efficace de la bande SO (m_{s0}), toutes ces bandes prenant un caractère s-p sous l'action du potentiel aperiodique. En l'absence de mesures de ces masses dans les alliages il a été supposé qu'elles variaient linéairement entre les valeurs connues qu'elles ont dans les composés binaires. Tout comme pour m_c et E_0 il existe des relations représentant la variation de ces masses avec la température [C69] qui permettent de faire les corrections éventuellement nécessaires. L'accord entre les valeurs ainsi corrigées et les valeurs expérimentales est assez bon en général.

Plus récemment, Hermann et Weisbuch [H77] ont utilisé le modèle à 5 bandes (équation 13) en ajoutant un terme correctif C afin d'inclure les effets des bandes autres que Γ_4^V et Γ_4^C . E_p et E'_p sont déterminés dans les composés binaires à partir de mesures de m_c et de g_c , le facteur de Landé de la bande de conduction qui est relié à ces deux paramètres. Ces auteurs fixent la correction C pour tous les semiconducteurs III-V à partir d'expériences de magnéto-optique sur Ge [A70]. Ils identifient C à $2F$ (équation 14) car E'_p est nul dans Ge pour des raisons de symétrie. Les deux bandes de conduction ayant la même parité. E_p et E'_p sont supposées varier linéairement dans les alliages et l'accord obtenu entre les valeurs calculées de cette façon et les mesures faites sur $Ga_{1-x}In_xAs$ et $In_{1-x}As_xSb$ semble satisfaisant. Remarquons toutefois que les corrections faites pour tenir compte de la température ne sont pas clairement décrites.

Les valeurs de m_c obtenues par des expériences de magnéto-optique

(équation 14) dans de nombreux semiconducteurs binaires III-V [A72, R76] sont en excellent accord avec celles mesurées par d'autres méthodes. L'équation 14 issue du modèle de bandes couplées est donc correcte dans les composés binaires. Si il s'avère qu'elle fonctionne encore dans les alliages sans qu'il soit nécessaire d'y apporter de corrections, cela voudra dire que la méthode générale développée au chapitre I s'applique bien aux alliages puisque les paramètres E_o, Δ_o, E_p et F utilisés dans le calcul de m_c proviennent de ce modèle. Autrement dit c'est l'accord entre les masses m_c calculées avec (14) et celles mesurées directement par ailleurs qui nous permet, avec bien sur le même genre de comparaison pour les autres paramètres, de justifier l'emploi du modèle de bandes couplées pour des alliages tels que $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$.

Nous allons donc montrer que les valeurs expérimentales de E_o, Δ_o, E_p et F issues de l'analyse des spectres photovoltaïques à 6K permettent de calculer m_c dans l'alliage $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ et d'obtenir d'excellentes valeurs sans qu'il soit nécessaire d'ajouter aucune correction. Les effets du désordre d'alliage sont inclus dans les variations de E_o, Δ_o, E_p et F .

C- Variations de F et E_p dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$

Nous avons déterminé E_p et F par l'analyse des spectres photovoltaïques (tableau IV 3). La variation de ces deux paramètres en fonction de la composition est représentée sur les figures 29 et 30. E_p varie de façon non linéaire et nous avons tracé la meilleure courbe quadratique (a) tenant compte de l'erreur sur chaque point expérimental. F est obtenu avec moins de précision et il est difficile de déterminer la forme de sa variation, nous avons néanmoins montré qu'elle pourrait être faiblement non linéaire sur la figure 29.

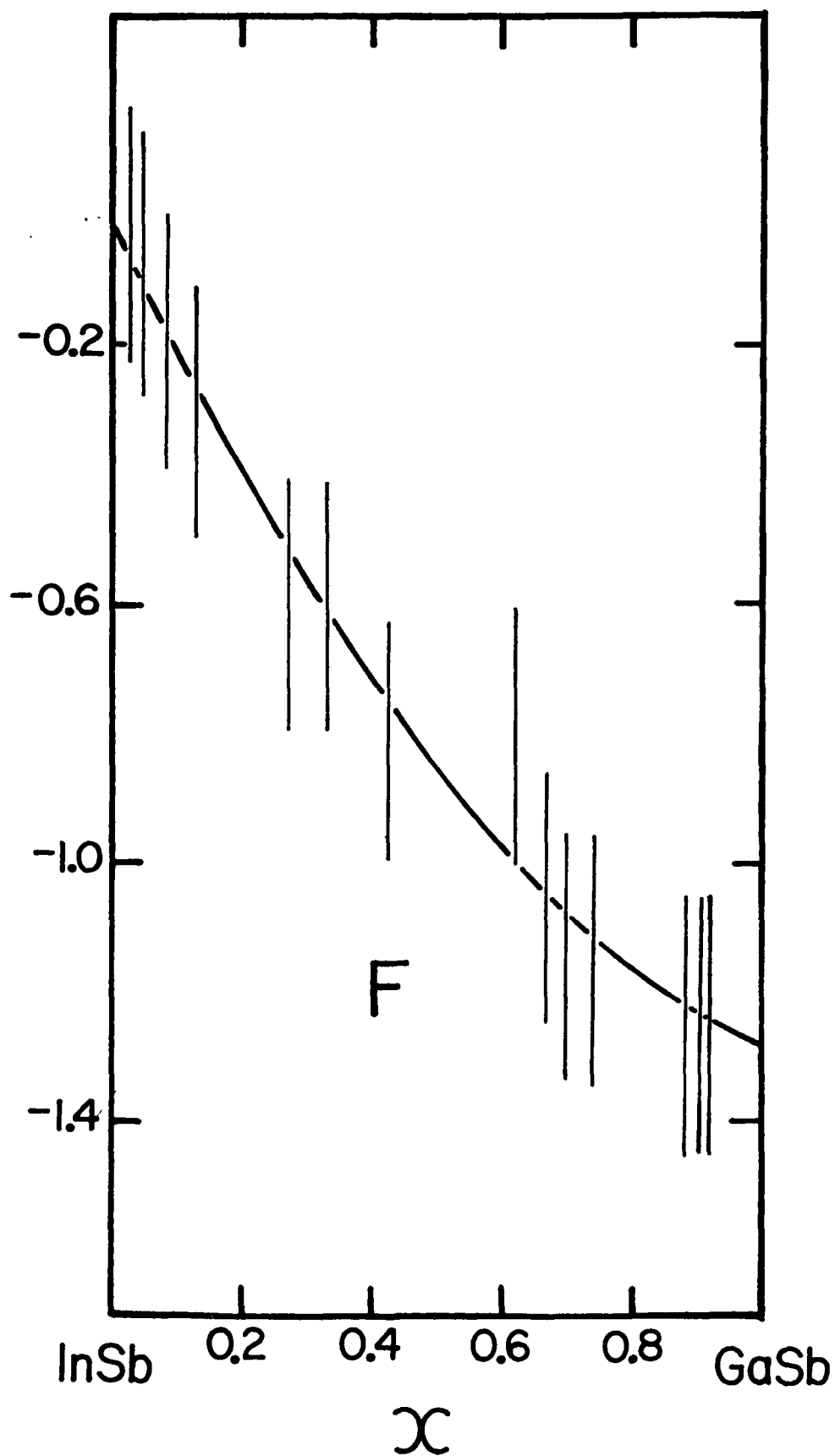
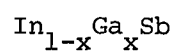


Figure 29

Variation de F en fonction de la composition dans



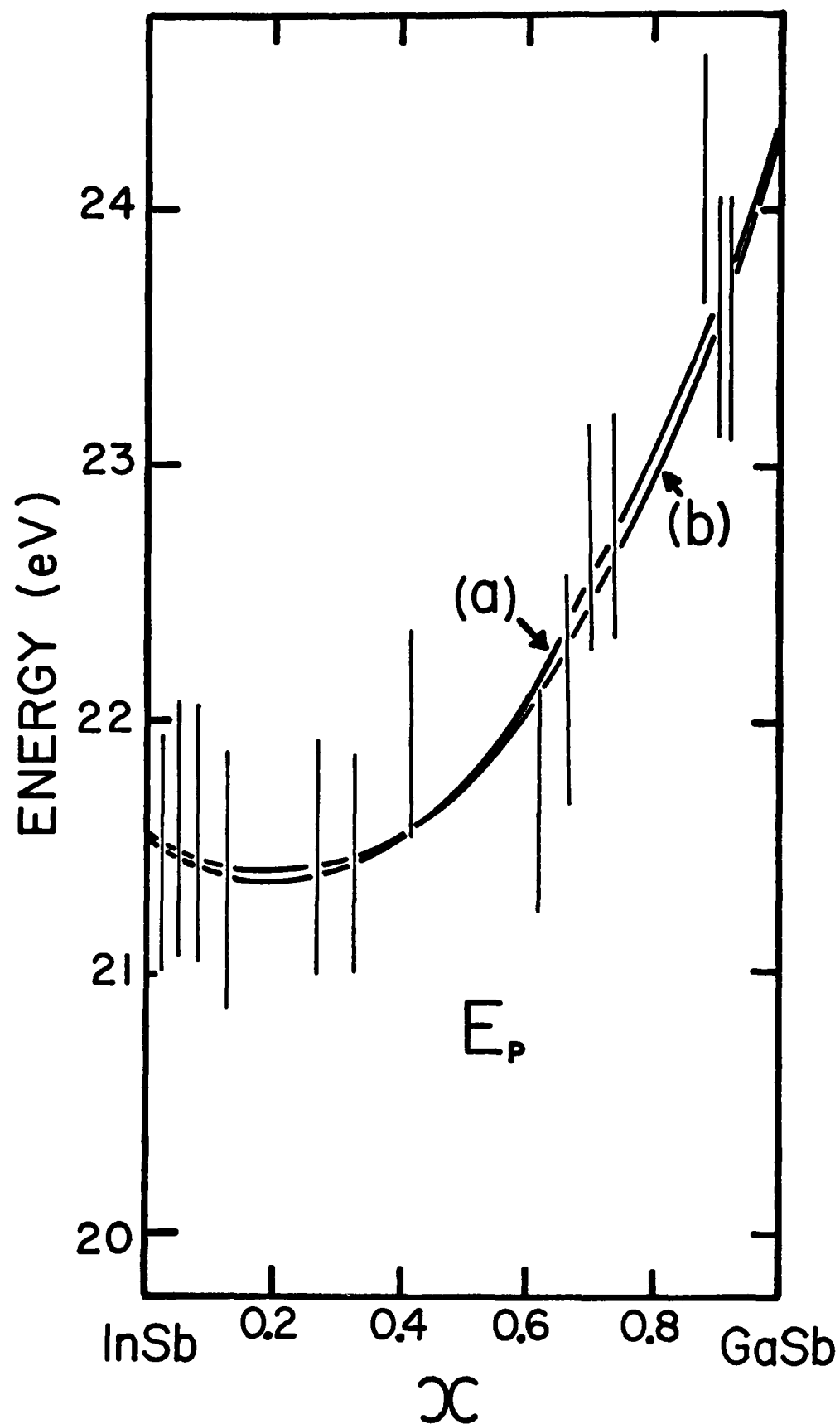
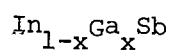


Figure 30

Variation de E_F en fonction de la composition dans



Nous allons montrer que si le désordre et les contraintes qui s'en suivent dans le cristal créent un mélange s-p entre les bandes de valence et de conduction du point Γ , [S74], ce mélange qui doit dépendre de la composition peut expliquer la non linéarité de E_p .

Si la bande de conduction contient un faible pourcentage d'états p et si la bande de valence contient des états s on peut écrire les fonctions d'onde de la façon suivante [S74]:

$$\begin{aligned}\psi_c &= (1-\beta^2)^{\frac{1}{2}} S + \frac{\beta}{\sqrt{3}} \sum_i P_i \\ \psi_v^i &= (1-\alpha^2)^{\frac{1}{2}} P_i + \alpha S\end{aligned}\quad (16)$$

avec $P_i = X, Y, Z$ (notation de 16 chap. I) où les coefficients sont tels que les fonctions soient normalisées et orthogonales. Cette dernière condition qui exprime que les bandes de conduction et de valence sont de symétries différentes donne

$$\beta = \frac{\sqrt{3}\alpha}{(1 + 2\alpha^2)^{\frac{1}{2}}}\quad (17)$$

L'énergie d'interaction en l'absence de mélange s'écrit (Voir 30b et 48 chap. I)

$$E_{p_0} = 2 |\langle S | P_i | P_i \rangle|^2 \quad (18)$$

On peut alors exprimer E_p l'énergie d'interaction en présence de mélange s-p en utilisant les relations (16), (17) et (18)

$$\begin{aligned}E_p &= \left[(1-\alpha^2)^{\frac{1}{2}} (1-\beta^2)^{\frac{1}{2}} + \frac{\alpha\beta}{\sqrt{3}} \right] E_{p_0} \\ E_p &= \frac{1}{1 + 2\alpha^2} E_{p_0}\end{aligned}\quad (19)$$

E_{p_0} varie linéairement entre InSb et GaSb et en prenant les deux valeurs extrêmes de la courbe (a) de la figure 30 on obtient

$$E_{p_0} = 21.6 + 2.7x \quad (20)$$

Il est impossible de connaître la dépendance exacte de α par rapport à x .

Nous avons donc choisi la forme de variation raisonnable suivante:

$$\alpha^2 = \alpha_0^2 x (1-x) \quad (21)$$

Nous avons ajusté α_0^2 pour que la courbe de $E_p(x)$ soit en bon accord avec la courbe expérimentale (a). La courbe (b) de la figure 30 a donc été calculée avec l'équation (19) dans laquelle on a substitué (20) et (21) avec $\alpha_0^2 = 0.11$. La valeur maximum de $\alpha^2(x)$, pour $x = 0.5$, est alors $\alpha^2(0.5) = 0.0275$ ce qui donne $\alpha = 0.16$ et $\beta = 0.28$.

Cette approximation simple montre donc qu'en présence du désordre d'alliage E_p ne varie pas linéairement. Notons que dans le cadre de cette approximation, $\Delta_0(x)$ est lui aussi affecté par le mélange s-p (ainsi que l'a montré Berolo [BE73]). On calcule Δ_0 avec la relation standard:

$$\Delta_0 = \frac{3i}{4} \langle P_x \left| \frac{\partial V}{\partial x} P_y - \frac{\partial V}{\partial y} P_x \right| P_y \rangle \quad (22)$$

Si l'on utilise les fonctions (16) on peut exprimer $\Delta_0(x)$ en fonction de $\Delta_{ov}(x)$ (interpolation linéaire) de la façon suivante:

$$\Delta_0 = \Delta_{ov} (1-\alpha^2) \quad (23)$$

$$\Delta_0 = \Delta_{ov} (1-\alpha_0^2 x (1-x)) \quad (24)$$

En utilisant la valeur numérique α_0^2 déterminée par la courbe $E_p(x)$ on

obtient pour $x = 0.5$

$$\Delta_{ov} - \Delta_0 \approx 21 \text{ meV}$$

L'accord satisfaisant de cette valeur avec la valeur expérimentale ($24 \pm 15 \text{ meV}$) doit être considéré avec prudence étant données la simplicité du modèle utilisé et l'incertitude expérimentale sur Δ_0 .

D- Variation de m_c calculée dans le modèle de bandes couplées

Sur la figure 31 nous avons représenté la variation de m_c à 6K calculée d'après l'équation (14) avec les valeurs expérimentales de E_0 , Δ_0 , E_p et F que nous avons présentées dans les sections précédentes. Sur la même figure, la seconde courbe ($T = 300K$) est celle publiée par Aubin et al [A69] à partir de différentes mesures; ce sont ces valeurs expérimentales à 300K que Berolo et al [BE73] ont utilisées pour justifier les corrections semi-empiriques à la relation (12). Il est évident que la variation de m_c obtenue par l'utilisation directe, sans aucune correction, de la formule (14) issue du modèle de bandes couplées est tout à fait satisfaisante. En effet, bien que les valeurs expérimentales de Aubin et al [A69] apparaissent être un peu trop grandes puisque supérieures aux valeurs de m_c acceptées pour InSb et GaSb, la variation calculée (6K) est semblable à la variation expérimentale (300K) et en outre la valeur de m_c déduite de notre courbe pour GaSb à 6K ($m_c = 0.042$) est en parfait accord avec la valeur acceptée de cette masse [A72].

Ce calcul de m_c à partir des valeurs mesurées expérimentalement de E_0 , Δ_0 , E_p et F montre donc qu'il n'est pas nécessaire de modifier le modèle $\vec{k} \cdot \vec{p}$ pour l'appliquer aux alliages puisque les effets du désordre dû

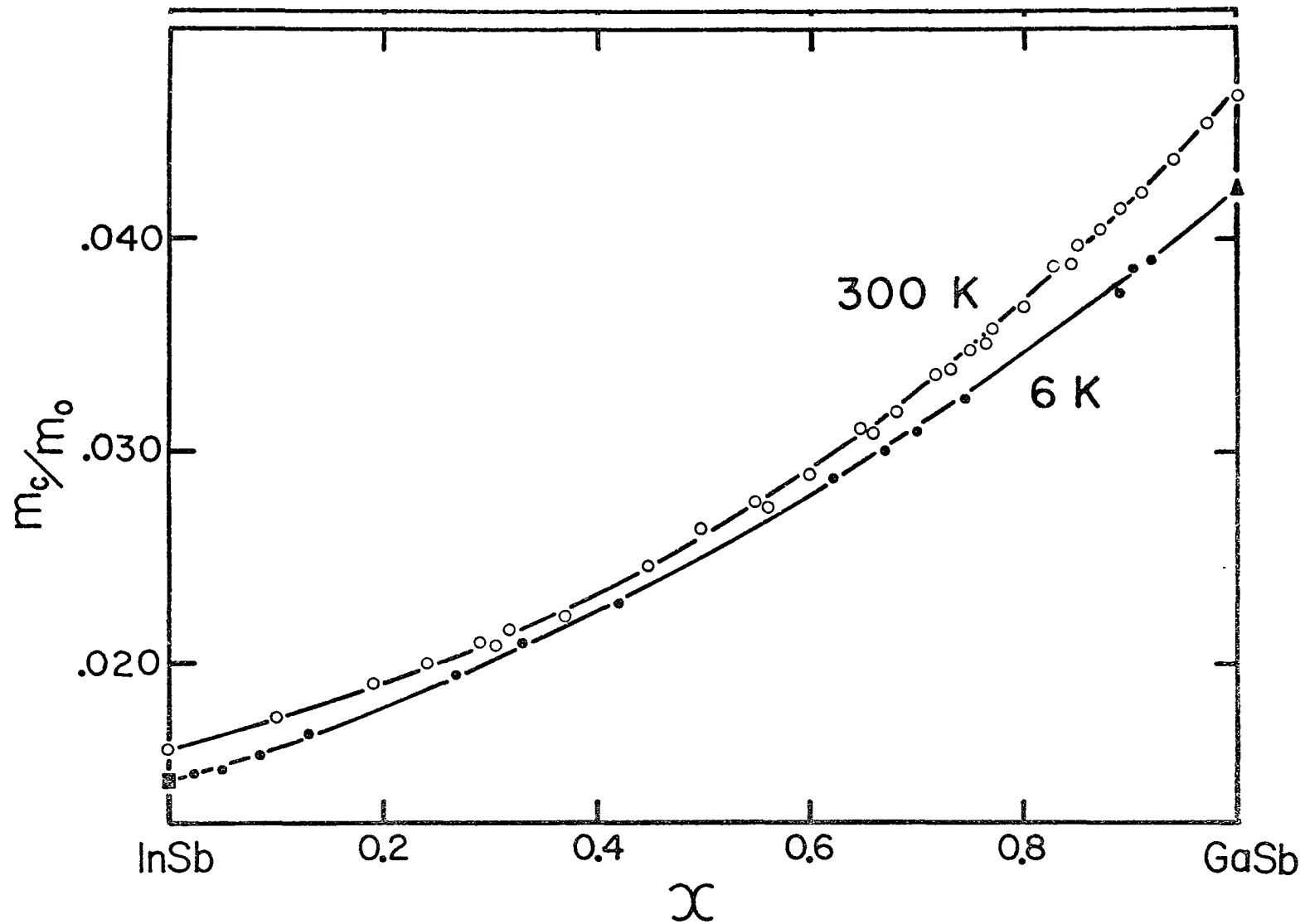


Figure 31

Comparaison de $m_c(x)$ calculée dans le modèle de bandes couplées (6K) et obtenue expérimentalement (300K) réf. A69, dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$

à la distribution aléatoire des atomes dans le solide apparaissent dans $E_o(x)$, $\Delta_o(x)$, $E_p(x)$, $F(x)$ et sont directement responsables de la non-linéarité de $m_c(x)$.

Nous allons montrer que g_c , le facteur de Landé de la bande de conduction, peut lui aussi être calculé correctement si l'on tient compte des interactions interbandes comme dans le calcul de m_c .

IV. Facteur de Landé de la bande de conduction (g_c)

Si l'on néglige toutes les interactions autres que E_p (modèle à 3 bandes), le facteur de Landé g_c peut être calculé dans le cadre de la méthode $\vec{k} \cdot \vec{p}$ par la relation suivante.

$$g_c = 2 \left[1 - \frac{E_p}{3} \left(\frac{1}{E_o} - \frac{1}{E_o + \Delta_o} \right) \right] \quad (25)$$

Sur la figure 32 nous avons porté (a) la variation de $g_c(x)$ calculée avec (25) pour la comparer aux valeurs mesurées directement par résonnance de spin électronique (ESR) dans InSb [B60], GaSb [H71] et $In_{1-x}Ga_xSb$ pour $x \leq 0.54$ [T70]. On voit que les résultats obtenus avec la relation (25) donnent des valeurs absolues de g_c trop petites. Cet écart par rapport aux valeurs expérimentales est dû au fait que la relation (25) néglige une partie des interactions entre la bande de conduction Γ_1^c et les autres bandes.

Dans le modèle à 5 bandes on traite exactement l'interaction $\Gamma_{1c} - \Gamma_{4c}$ (Figure 28) ce qui ajoute au membre de droite de (25) un terme qui est le suivant:

$$2 \frac{E'_p}{3} \left(\frac{1}{E(\Gamma_7^c) - E_o} - \frac{1}{E(\Gamma_8^c) - E_o} \right) \quad (26)$$

Pour pouvoir utiliser ce terme supplémentaire dans le calcul de g_c il faut

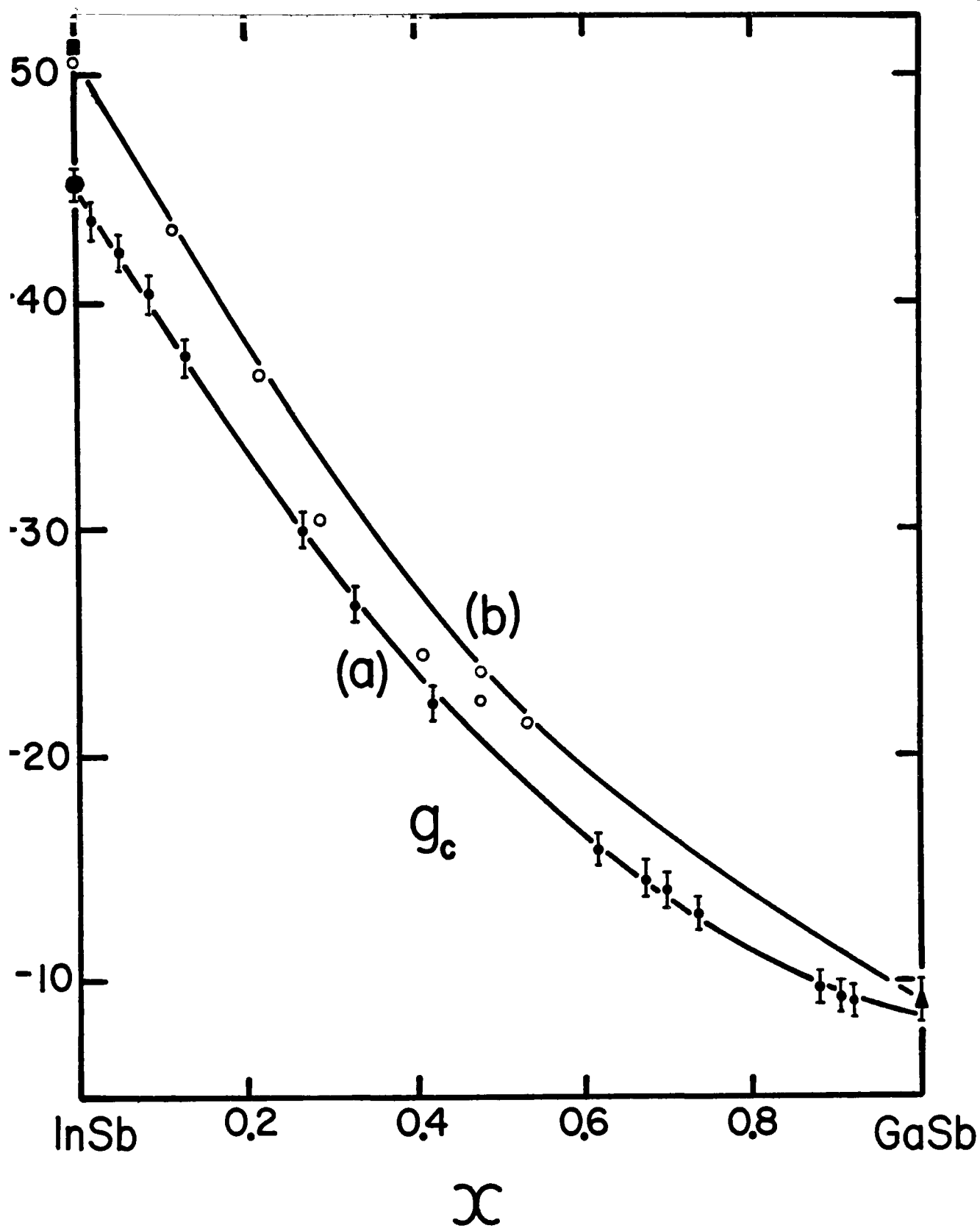


Figure 32

$g_c(x)$ calculé avec les relations 25(a) et 27(b) dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ comparé aux valeurs expérimentales Ref. T70 (°), B60 (■), H71 (▲).

connaître E'_p , $E(\Gamma_7^C)$, $E(\Gamma_8^C)$. Or ces paramètres n'ont jamais été mesurés dans l'alliage $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$. En outre l'inclusion dans notre modèle de bandes couplées des bandes Γ_7^C et Γ_8^C qui ont une dégénérescence respective d'ordre 2 et 4 ferait passer la dimension du hamiltonien d'interaction principal (Voir chapitre I) de 8×8 à 14×14 . Pour diagonaliser numériquement ce nouvel hamiltonien il faudrait donc introduire de nouveaux paramètres dont E'_p , $E(\Gamma_7^C)$ et $E(\Gamma_8^C)$. Comme nous n'avons pas observé de transitions vers les bandes Γ_7^C et Γ_8^C , ces trois paramètres seraient des paramètres ajustables à ajouter à E_0 , Δ_0 , E_p , F , γ_1^L , γ_2^L , γ_3^L . Il serait alors impossible de les déterminer avec précision car leurs effets sur les énergies de transition observées est faible. Il est donc préférable d'estimer la correction à ajouter à la relation (25) de la façon suivante.

Par analogie avec la formule (14) qui donne m_c on peut écrire g_c de la manière suivante [J70]

$$g_c = 2 \left[1 - \frac{E_p}{3} \left(\frac{1}{E_0} - \frac{1}{E_0 + \Delta_0} \right) \right] + g_{AT} \quad (27)$$

Le terme g_{AT} tient compte des interactions entre la bande de conduction Γ_1^C et les autres bandes (exceptée la bande de valence Γ_4^V). On peut obtenir g_{AT} à partir de la différence d'énergie des niveaux de même indice n dans les deux échelles α et β de la bande de conduction [PI67] mais on peut, plus simplement, estimer g_{AT} dans l'alliage $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ à partir des valeurs obtenues pour InSb et GaSb. En comparant les valeurs expérimentales (ESR) de g_c pour ces deux composés et les valeurs calculées par la relation (25) on obtient:

$$g_{AT} \text{ (InSb)} = - 5.9$$

$$g_{AT} \text{ (GaSb)} = - 1.4$$

Pour cela il suffit d'utiliser les relations (14) et (27) qui donnent

$$\frac{\frac{1}{m_c} - 1 - 2F}{g_c - 2 - g_{AT}} = - \frac{3}{2} \frac{E_0}{\Delta_0} - 1 \quad (28)$$

E_0 , Δ_0 , F et m_c sont tirés de nos mesures et g_c est pris des mesures de ESR. Remarquons que le pourcentage de correction est à peu près le même pour InSb et GaSb.

$$\frac{g_{AT}}{g_c} \text{ (InSb)} = \frac{5.9}{51.3} \approx 11.5\%$$

$$\frac{g_{AT}}{g_c} \text{ (GaSb)} = \frac{1.4}{9.25} \approx 15\%$$

En interpolant linéairement g_{AT} dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ on peut alors calculer $g_c(x)$ avec la relation (27). Cette variation est représentée par la seconde courbe, (b), sur la figure 32. Elle est en accord satisfaisant avec les valeurs expérimentales [T70] et cela confirme donc que, tout comme pour m_c , le modèle $\vec{k} \cdot \vec{p}$ permet d'obtenir la variation des paramètres de bandes dans l'alliage $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ si l'on inclut dans ce modèle les interactions entre la bande de conduction et les bandes autres que la bande de valence.

V. Paramètres de Luttinger et masses efficaces de la bande de valence.

Les autres paramètres déduits directement de l'analyse des énergies de transition entre niveaux de Landau sont les paramètres de Luttinger

$\gamma_1^L, \gamma_2^L, \gamma_3^L$. Ils n'ont jamais été mesurés dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$, nous ne pourrions donc que comparer les valeurs obtenues pour InSb et GaSb avec les résultats déjà publiés. La figure 33 représente la variation de ces 3 paramètres en fonction de la composition. Nous comparons dans le tableau V3 nos résultats aux deux extrémités de l'alliage avec les résultats obtenus par divers auteurs. L'accord est excellent avec Pidgeon et Brown [P66] pour InSb et Fillion et Fortin [FI73] pour GaSb. On remarque sur la figure 33 que la variation des trois paramètres n'est pas tout à fait linéaire. Aucun calcul théorique n'a jamais été fait pour obtenir ces paramètres dans les alliages. Chacun d'entre eux est une combinaison linéaire de cinq interactions (30a, 33 et 48 chap. I). Il faudrait obtenir des mesures indépendantes de toutes ces interactions pour pouvoir interpréter en détail la nonlinéarité observée. On peut cependant raisonnablement supposer que le désordre d'alliage qui crée un mélange inter-bande et intrabande [BE73] est à l'origine de la légère courbure de la variation des paramètres de Luttinger. Cependant les mélanges sont différents dans les bandes de différentes symétries qui interagissent avec la bande de valence et il est impossible en l'absence d'une connaissance exacte du potentiel apériodique de calculer son effet sur les diverses interactions.

Les paramètres de Luttinger permettent de calculer les masses $m_{\ell h}$ et m_{hh} des trous légers et lourds de la bande de valence. En utilisant les équations approximatives (46 et 47 chap. I) qui donnent l'énergie des niveaux de Landau dans la bande de valence on obtient des relations analogues à celles de Roth et al [R59]:

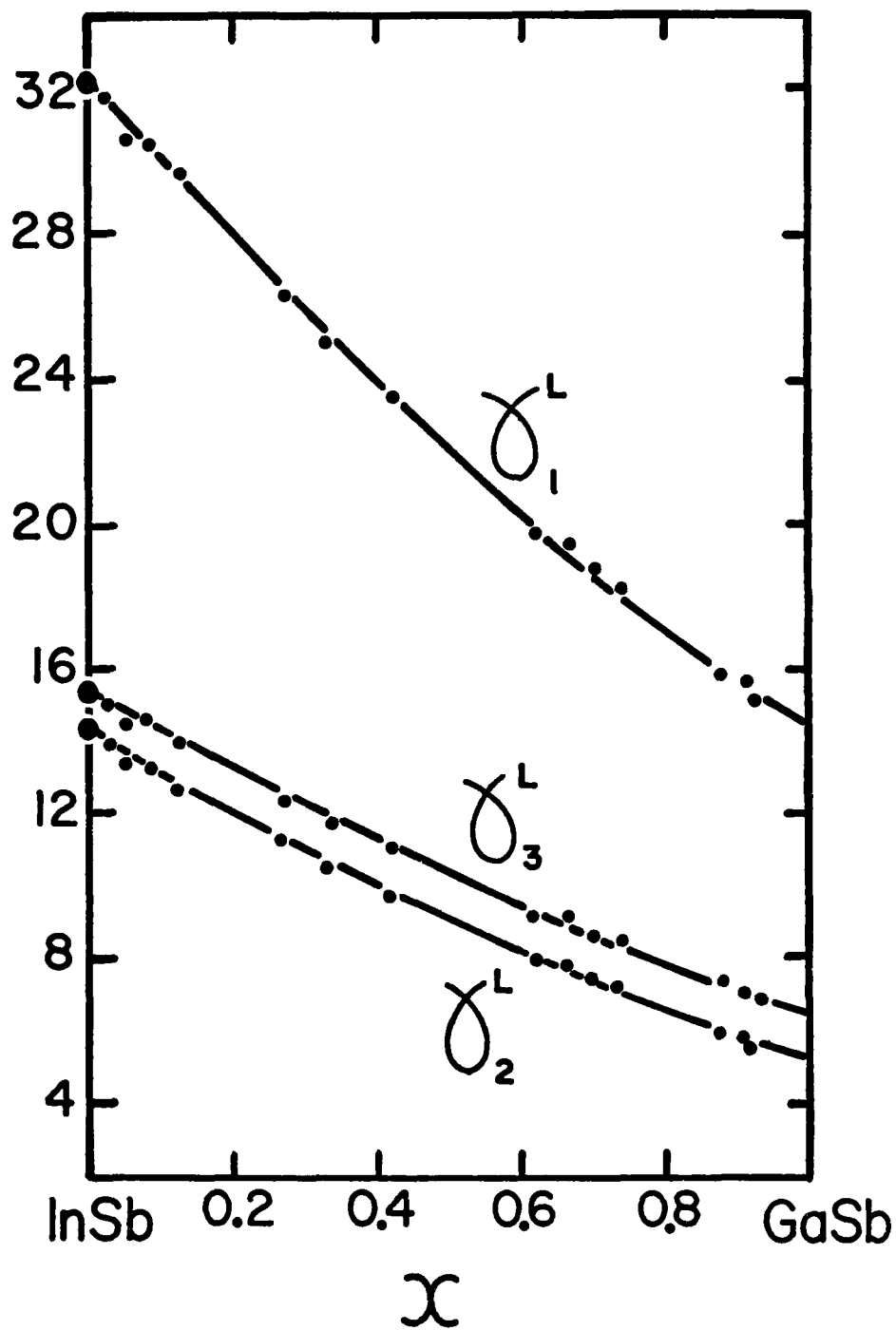


Figure 33

Variation des paramètres de Luttinger γ_i^L dans

$\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$

TABLEAU V 3

Paramètres de Luttinger dans InSb et GaSb

Matériaux							
InSb	γ_1^L	36 ^(a)	32.5 ^(b)	33.51 ^(c)	35.08 ^(d)	32.4 ^(e)	
	γ_2^L	14.5	14.3	14.48	15.64	14.3	
	γ_3^L	16.2	15.4	15.65	16.91	15.4	
GaSb	γ_1^L	13.3 ^(f)	11.0 ^(g)	11.2 ^(h)	14.5 ⁽ⁱ⁾	11.8 ^(d)	14.3 ^(e)
	γ_2^L	4.4	3.0	3.9	5.3	4.03	5.2
	γ_3^L	5.7	4.4	4.9	6.6	5.26	6.5

(a) Ref. Z61

(f) Ref. R72

(b) Ref. P66

(g) Ref. S66

(c) Ref. P69

(h) Ref. H68

(d) Ref. L71

(i) Ref. FI73

(e) Nos résultats

$$(i) \quad \frac{m_{\ell h}}{m_0} = \left\{ \gamma_1^L + [(\gamma_{\theta\phi}^L)^2 + 3(\gamma_{\theta\phi}'^L)^2]^{\frac{1}{2}} \right\}^{-1} \quad (29a)$$

$$(ii) \quad \frac{m_{hh}}{m_0} = \left\{ \gamma_1^L - [(\gamma_{\theta\phi}^L)^2 + 3(\gamma_{\theta\phi}'^L)^2]^{\frac{1}{2}} \right\}^{-1} \quad (29b)$$

$\gamma_{\theta\phi}^L$ et $\gamma_{\theta\phi}'^L$ sont calculés avec les relations (34 chap. I). Les masses sont ainsi obtenues avec leur anisotropie et l'on peut donc en particulier calculer les valeurs de $m_{\ell h}$ et m_{hh} pour les directions principales [100], [110], [111]. La masse m_{hh} des trous lourds apparaît, d'après (29b) comme l'inverse de la différence de deux termes de valeurs à peu près égales. Elle est donc très sensible aux incertitudes expérimentales sur les paramètres de Luttinger. Il est donc plus utile de caractériser m_{hh} non pas par sa valeur numérique mais par son anisotropie au point Γ , celle-ci étant moins sensible aux faibles variations des paramètres de Luttinger car quelque soit l'orientation (θ, ϕ) étudiée la masse $m_{hh}(\theta, \phi)$ varie à peu près de la même façon avec ces paramètres. Si on définit le paramètre d'anisotropie de m_{hh} de la façon suivante:

$$A(m_{hh}) = \frac{m_{hh}[111] - m_{hh}[100]}{2 \overline{m_{hh}}} \quad (30)$$

où $\overline{m_{hh}}$ est une masse moyenne fictive calculée avec la valeur moyenne sur 4π de $f(\theta, \phi)$ (34 chap. I), on obtient:

$$A(m_{hh}) \approx 0.16 \pm 0.02 \text{ (InSb)}$$

$$A(m_{hh}) \approx 0.20 \pm 0.02 \text{ (GaSb)}$$

L'anisotropie des masses des trous lourds augmente donc légèrement entre InSb et GaSb, mais il est difficile de dire si cette variation est linéaire

ou non dans l'alliage étant donné l'imprécision sur A .

La masse $m_{\ell h}$ des trous légers est moins sensible aux variations des γ^L puisqu'elle est calculée à partir de la somme de deux termes (29a) et son anisotropie, calculée de façon analogue à (31) est faible dans tout l'alliage (≤ 0.02). Nous avons donc représenté sur la figure 34 la variation de la masse moyenne $\overline{m_{\ell h}}$ dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$. On remarque que cette variation, obtenue pour la première fois dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$, n'est pas linéaire. Cette non-linéarité est évidemment reliée à celle des paramètres de Luttinger.

Donc ici encore, les masses efficaces peuvent être calculées directement à partir de paramètres expérimentaux et leur variation non linéaire due aux effets du désordre d'alliage est directement liée à celles des paramètres.

Pour terminer cette étude des paramètres de bandes de $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ notons que le modèle de bandes couplées permet d'obtenir aussi le quatrième paramètre de Luttinger κ^L ainsi que m_{so} et g_{so} la masse efficace et le facteur g de la bande spin-orbite.

On peut calculer κ^L de façon approximative [V68]

$$\kappa^L \approx \gamma_3^L + \frac{2}{3} \gamma_2^L - \frac{1}{3} \gamma_1^L - \frac{2}{3} \quad (31)$$

Connaissant la variation expérimentale des paramètres γ^L on déduit aisément celle de κ^L avec (31). Comme la bande Γ_7^V (SO) fait partie des 8 états principaux étudiés par le modèle du chapitre I on peut, de la même façon que pour la bande de conduction Γ_1^C obtenir l'énergie des niveaux de Landau de cette bande. En développant le déterminant (41 chap. I) comme nous l'avons expliqué plus tôt on peut déduire l'équation approximative qui donne l'énergie des niveaux et de cette équation on obtient alors en première

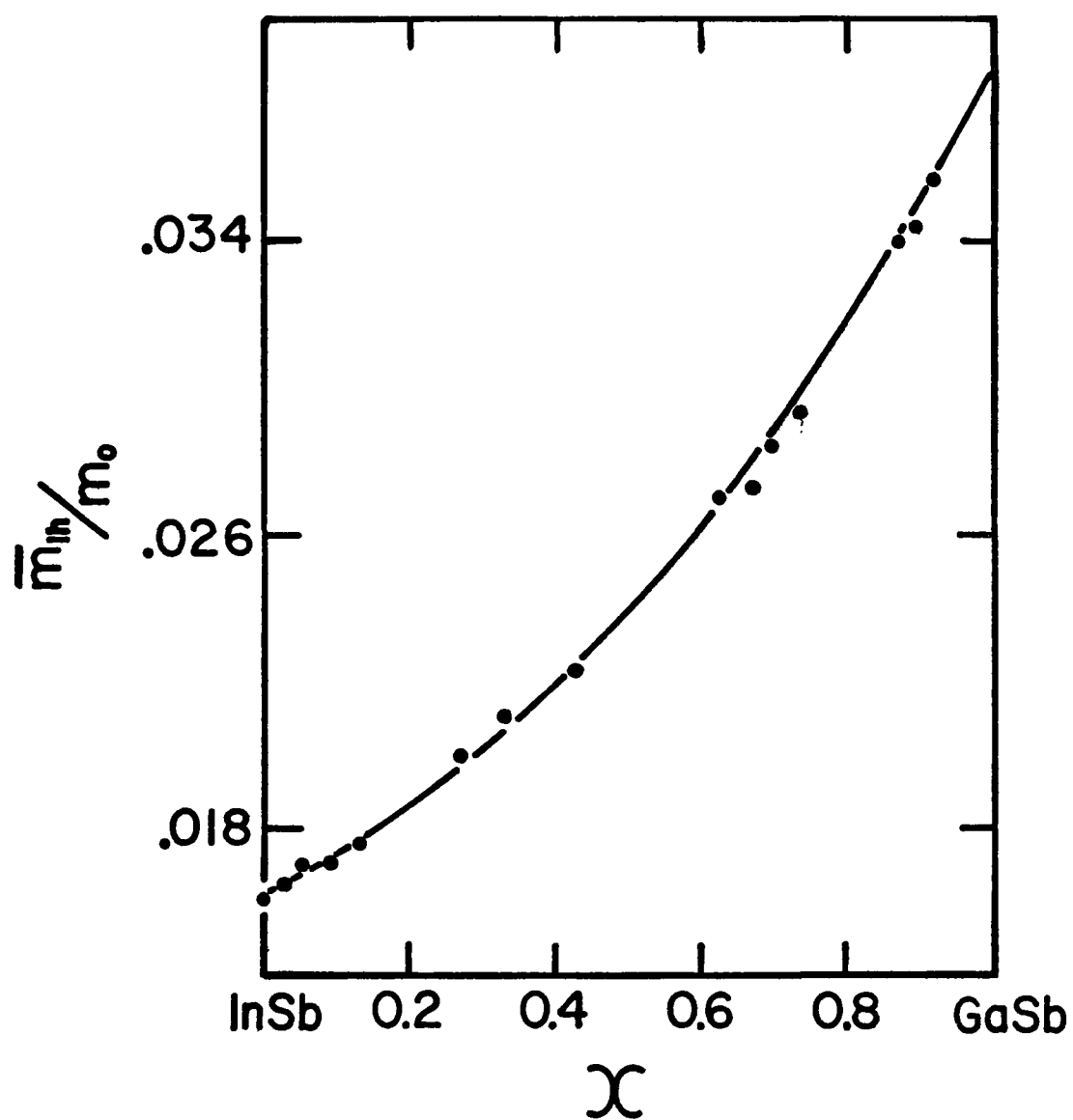
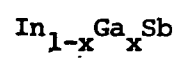


Figure 34

Variation de la masse moyenne des trous légers dans



approximation [R70]

$$m_{s0} = \left[\gamma_1^L - \frac{E_p}{3E_0} \left(\frac{\Delta_0}{E_0 + \Delta_0} \right) \right]^{-1} \quad (32)$$

et

$$g_{s0} = -2 \left[\kappa^L + 1 - \frac{E_p}{3E_0} \left(\frac{\Delta_0}{E_0 + \Delta_0} \right) \right] \quad (33)$$

Il serait intéressant de mesurer m_{s0} et g_{s0} par exemple à partir de l'observation des transitions entre niveaux de Landau associées à $E_0 + \Delta_0$ et de comparer les valeurs ainsi obtenues dans $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ aux valeurs calculées par les relations (32) et (33). On verrait alors si ces relations sont suffisantes pour expliquer la forme de la variation de ces deux paramètres à travers l'alliage.

Nous allons revenir sur ce point dans la conclusion générale de ce travail.

C O N C L U S I O N

Cette étude est la première du genre sur un alliage ternaire III-V. Elle nous a permis de mettre en évidence de nombreux faits dont les principaux sont les suivants. La magnéto-optique interbande qui avait surtout été utilisée jusque là pour étudier des monocristaux est une méthode très efficace pour les polycristaux comme nous l'avons montré en particulier avec InSb. Le modèle de bandes couplées développé au début de ce travail permet aussi d'obtenir directement la majorité des paramètres de bandes dans l'alliage $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ comme dans les composés binaires. Le désordre d'alliage et ses effets sur la variation des paramètres en fonction de la composition est traité de façon satisfaisante puisque les paramètres, tel m_c par exemple, calculés à partir de valeurs expérimentales de E_0, Δ_0, F et E_p sont en bon accord avec les mesures faites par d'autres méthodes. Il semble donc que le modèle $\vec{k} \cdot \vec{p}$, dont la méthode de bandes couplées est issue, puisse s'appliquer directement aux alliages III-V, ou tout au moins à $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$, dans la mesure où l'on tient compte d'un assez grand nombre d'interactions interbandes. Ces interactions sont modifiées par la présence du désordre d'alliage et ces modifications se répercutent dans les variations non linéaires des masses efficaces. Les corrections semi-empiriques proposées par Berolo ne sont donc pas nécessaires si l'on peut mesurer directement les paramètres d'interactions. Toutefois l'idée qui est à la base de ces corrections (mélange inter et intrabande) nous semble correcte puisqu'elle permet d'interpréter de façon satisfaisante la variation non linéaire des paramètres d'interaction (E_p par exemple). Nous n'avons pas pu cependant étudier complètement les résultats concernant la bande Γ_7^V (SO) puisqu'aucune mesure expérimentale directe sur cette bande n'a été faite. Il serait donc intéressant de compléter ce travail à ce sujet. On pourrait par exemple

utiliser la magnéto-réflexivité modulée par un champ électrique (Electro-magneto-reflectance) qui a déjà mis en évidence des transitions entre niveaux de Landau à des énergies nettement supérieures au gap E_0 [J74]. Cette méthode pourrait aussi donner des valeurs précises à basse température des paramètres de bandes à des points de symétrie autres que Γ (L ou X par exemple). Il serait utile en outre d'appliquer ces méthodes de la magnéto-optique interbande à d'autres alliages afin de pouvoir généraliser les conclusions présentées ici sur $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$.

Du point de vue expérimental, la technique utilisée pour enregistrer les spectres photovoltaïques en champ magnétique à 6K pourrait bénéficier de quelques modifications. Une automatisation complète n'est pas faisable mais on pourrait remplacer l'enregistrement graphique par un enregistrement électronique à l'aide d'un analyseur digital éventuellement relié au terminal de l'ordinateur. Quelques essais avec un tel analyseur se sont révélés très encourageants.

Nous espérons aussi étudier le déplacement des excitons dans le champ magnétique dans les alliages mais pour cela il serait préférable d'utiliser des monocristaux ce qui permettrait d'employer la théorie d'Altarelli [AL73, AL74]. Un autre travail qui pourrait suivre celui-ci est l'étude de transitions à plusieurs photons à l'aide d'un laser à longueur d'onde variable. Une telle étude sur un semiconducteur en présence d'un champ magnétique doit permettre d'obtenir les paramètres des bandes de valence et de conduction indépendamment [F70, G71]. Enfin la variation des paramètres en fonction de la température qui est étudiée expérimentalement actuellement par G. Goodchild sur différents alliages devrait apporter des résultats intéressants.

ANNEXES

Annexe A Notations, Théorie des Groupes et paramètres de bandes

I. Représentations irréductibles du groupe T_d (point Γ)

II. Paramètres $\vec{k} \cdot \vec{p}$

Annexe B Unités de champ magnétique

Annexe C Anisotropie des niveaux de Landau dans GaSb

Annexe D Préparation de $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$

I. Quelques remarques sur la formation des alliages

II. Méthodes de préparation de $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$

A N N E X E A

NOTATIONS, THEORIE DES GROUPEET PARAMETRES DE BANDES

Il est souvent difficile de comparer des travaux différents pour la simple raison que les auteurs ont utilisé des notations non standard et qu'ils évitent soigneusement d'indiquer comment les paramètres qu'ils utilisent sont reliés à ceux déjà publiés. Les travaux faisant appel à la théorie des Groupes tombent souvent dans ce travers, il en est de même pour de nombreux articles utilisant le modèle $\vec{k} \cdot \vec{p}$. Le but de cette annexe est de clarifier un peu la situation dans ces deux domaines.

I. Représentations irréductibles du groupe T_d (point Γ)

Les états d'énergie dans un solide cristallin peuvent être classifiés en fonction de leur symétrie. Cette classification se fait dans le cadre de la théorie des Groupes [W59]. Nous n'entrerons pas dans les détails de cette théorie dont on peut trouver des résumés dans de nombreux ouvrages de physique du solide [B75 par exemple]. L'ensemble des opérations de symétrie qui laissent un cristal inchangé forme le groupe d'espace du cristal. De ce groupe on peut extraire un groupe facteur qui est un groupe ponctuel dont les éléments sont les parties rotationnelles des éléments du groupe d'espace. Dans l'espace réciproque on appelle petit groupe ponctuel de $\vec{k}$ (ou simplement groupe de $\vec{k}$) le groupe qui laisse le vecteur $\vec{k}$ inchangé (à un vecteur du réseau réciproque près). En particulier au point Γ ($k = 0$), centre de la zone de Brillouin, le groupe de $\vec{k}$ coïncide avec le groupe ponctuel du cristal. Les opérations d'un groupe peuvent être représentées par des matrices dont les produits doivent suivre les règles de multiplication du groupe. Une telle représentation est dite irréductible si il est

impossible de réduire les matrices en somme directe de matrices de plus petites dimensions. Ce sont ces représentations irréductibles du groupe de $\vec{k}$ qui servent à classer les valeurs propres du hamiltonien du cristal, c'est à dire les états d'énergie électronique de ce cristal. En général la notation utilisée pour les représentations irréductibles du groupe de k fait appel à la lettre qui symbolise le point ou la direction correspondante dans la zone de Brillouin. Ainsi, aux point Γ , X , L ou à la direction Λ on assignera des représentations notées Γ_1 , X_4 , L_2 ou Λ_3 par exemple.

Dans un cristal de structure zinc-blende le groupe de $\vec{k}$ au point Γ est T_d , sous groupe de O_h . Pour cette raison certains auteurs utilisent pour T_d la notations de O_h pour les symétries correspondantes (notation BSW [B36]). D'autres auteurs utilisent la notation de Koster, (K) [K63]. Nous avons choisi la notations de Kane [K57] qui est celle de Von der Lage et Bethe, (LB) [V47]. Lorsqu'on tient compte du spin des électrons on passe du groupe simple (T_d) au groupe double (T_d^+) ceci à cause du fait que dans l'espace des spins une rotation de 2π n'est pas une identité. Le tableau A1 permet de comparer les notations que nous avons utilisées avec celles d'autres auteurs.

Il arrive fréquemment que plusieurs bandes aient la même symétrie, dans le chapitre V nous avons différencié de telles bandes par les lettres c et v (Γ_7^c , Γ_7^v par exemple) pour nous référer à des bandes de conduction ou de valence.

II. Paramètres $\vec{k}, \vec{p}$

Nous avons utilisé les paramètres définis par Kane [K57] et le tableau A2 permettra de les relier à ceux d'autres auteurs comme Dresselhaus et al [DR55]. Il faut remarquer que la même lettre peut être employée par

TABLEAU A 1

REPRESENTATIONS IRREDUCTIBLES DE T_d^+

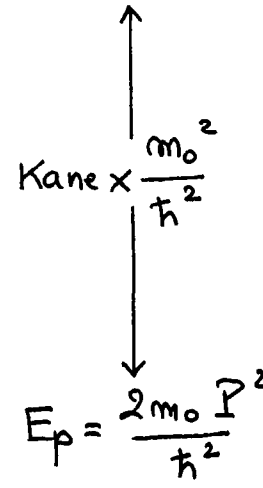
Γ_1	Γ_2	Γ_3	Γ_4	Γ_5	Γ_6	Γ_7	Γ_8	L B
Γ_1	Γ_2	Γ_{12}	Γ_{15}	Γ_{25}	Γ_6	Γ_7	Γ_8	BSW
Γ_1	Γ_2	Γ_3	Γ_5	Γ_4	Γ_6	Γ_7	Γ_8	K

REFERENCES

L B	V47	D55	K57	BE66				
BSW	B36	C63	G67	L71	V72	B75	C77	
K	K63	H77						

TABLEAU A 2

Principales notations pour les paramètres $\vec{k} \cdot \vec{p}$

Kane [57]	Nos Paramètres	[DR55]	[G67]	[D55]
A		$F = A - \frac{P^2}{E_0}$	$F' = \frac{2m_0 A}{\hbar^2}$	$L = A + B - \frac{P^2}{E_0}$
B		$G = \frac{B}{2}$	$G = \frac{m_0 B}{\hbar^2}$	$M = C + D$
C		$H_1 = C$	$H_1 = \frac{2m_0 C}{\hbar^2}$	$N = A - \frac{P^2}{E_0}$
D		$H_2 = D$	$H_2 = \frac{2m_0 D}{\hbar^2}$	$-\frac{B}{2} + C - D$
F				
G				
P			$E_p = \frac{2m_0 P^2}{\hbar^2}$	

Luttinger [L56] utilise les paramètres de [D55] L, M, N et les appelle

A, B, C

différentes personnes pour représenter différentes interactions. En outre certains auteurs ont utilisé des paramètres sans dimension en factorisant m_0 et $\hbar$.

La différence fondamentale entre [DR55 et D55] et les autres auteurs réside dans le fait que ces auteurs étudient seulement la bande de valence et traitent la bande de conduction en même temps que toutes les autres bandes dans leurs interactions avec la bande de valence, d'où l'origine du terme $\frac{p^2}{E_0}$. On retrouve cette différence dans les deux ensembles de paramètres γ . Ceux de Luttinger [L56] ne séparent pas la bande de conduction des autres bandes, ceux de Pidgeon et Brown [P66] séparent les deux interactions.

On obtient donc:

i) Luttinger [L55, L56]

$$\frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_1^L = -\frac{1}{3} (L + 2M) - \frac{\hbar^2}{2m_0}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_2^L = -\frac{1}{6} (L - M)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_3^L = -\frac{1}{6} N$$

ii) Groves et al [G67]

$$\frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_1 = -\frac{1}{3} (A + B + 2C + 2D) - \frac{\hbar^2}{2m_0}$$

$$\frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_2 = -\frac{1}{6} (A + B - C - D)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_3 = -\frac{1}{6} (A - \frac{B}{2} + C - D)$$

iii) Notre notation [P66]

$$\gamma_1 = -\frac{2}{3} m_0 (A + B + 2C + 2D) - 1$$

$$\gamma_2 = -\frac{1}{3} m_0 (A + B - C - D)$$

$$\gamma_3 = -\frac{1}{3} m_0 (A - \frac{B}{2} + C - D)$$

On vérifie facilement les relations

$$\gamma_1^L = \gamma_1 + \frac{2m_0}{\hbar^3} \frac{P^2}{3E_0} = \gamma_1 + \frac{E_P}{3E_0}$$

$$\gamma_2^L = \gamma_2 + \frac{m_0}{\hbar^2} \frac{P^2}{3E_0} = \gamma_2 + \frac{E_P}{6E_0}$$

$$\gamma_3^L = \gamma_3 + \frac{m_0}{\hbar^2} \frac{P^2}{3E_0} = \gamma_3 + \frac{E_P}{6E_0}$$

Le quatrième paramètre de Luttinger κ^L est relié aux paramètres d'interactions de la façon suivante [DR55]

$$\frac{\hbar^2}{2m} \kappa^L = -\frac{1}{6} (F - G - H_1 + H_2) - \frac{\hbar^2}{6m_0}$$

Dans le modèle de bandes couplées on obtient

$$\kappa = -\frac{1}{3} m_0 (A - \frac{B}{2} - C + D) - \frac{1}{3}$$

donc

$$\kappa^L = \kappa + \frac{m_0}{\hbar^2} \frac{P^2}{3E_0} = \kappa + \frac{E_P}{6E_0}$$

L'interaction D (ou H_2) est très faible parce qu'elle fait intervenir des bandes de symétrie Γ_5 qui sont éloignées de la bande de valence:

$$D = \sum_{n,\ell} \frac{|\langle x | p_y | \Gamma_5(n,\ell) \rangle|^2}{\epsilon_0 - \epsilon_n}$$

si on néglige D on obtient alors:

$$\kappa^L \approx \gamma_3^L + \frac{2 \gamma_2^L}{3} - \frac{\gamma_1^L}{3} - \frac{2}{3}$$

Cette relation a été utilisée pour réduire le nombre de paramètres dans tous les travaux de magnéto-optique interbande. Notons finalement que de nombreux auteurs utilisent les paramètres de Luttinger sans l'indiquer par la lettre L, comme nous l'avons fait ici, d'où certaines confusions.

A N N E X E B

UNITES DE CHAMP MAGNETIQUE

Dans l'équation de Schrödinger pour un semiconducteur dans un champ magnétique apparait un coefficient qui a la dimension d'une énergie.

$$\Delta = \frac{e \hbar}{m_0 c} H$$

Dans le système Gaussien d'unités électromagnétiques on a l'habitude d'écrire $H = \nabla \times A$ au lieu de $B = \nabla \times A$ dans le vide. Dans ce cas, lorsqu'on étudie l'effet du champ magnétique sur un semiconducteur par exemple, la variable p , canonique de x le déplacement, devient:

$$\vec{p} - \frac{e \vec{A}}{c}$$

pour une charge située dans un champ de potentiel vecteur A . Ce terme $(\vec{p} - \frac{e \vec{A}}{c})$ est à l'origine du coefficient Δ qui apparait donc comme écrit dans le système Gaussien avec H à la place de B .

Lorsque l'on fait un calcul numérique avec ce coefficient Δ , par exemple pour calculer les énergies des niveaux de Landau, on peut utiliser le Système International en remplaçant $\frac{B}{c}$ (Gauss) par B (tesla), ce qui donne

$$\Delta = \frac{e \hbar}{m_0} B$$

avec

$$\hbar = 4.1357 \times 10^{-15} \text{ eV s}$$

$$e = 1.6021 \times 10^{-19} \text{ C}$$

$$m_0 = 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg}$$

B en tesla

$$\Delta = (0.11577 \times 10^{-3} B) \text{ eV}$$

Référence [B64] pages 428, 431 Vol 1 et page 41 Vol 2.

A N N E X E C

ANISOTROPIE DES NIVEAUX DE LANDAU DANS GaSb

Dans le chapitre I nous avons montré que le modèle de bandes couplées conduisant aux matrices d'interaction $H'_{oa}{}^{44}$ et $H'_{ob}{}^{44}$ permettait d'obtenir l'énergie des niveaux de Landau dans les semiconducteurs III-V avec leur anisotropie au point Γ . Nous avons présenté les résultats obtenus sur InSb et dans cette annexe nous donnons les résultats des calculs faits sur GaSb.

Sur la figure C1 nous avons tracé la variation des niveaux $a^+(10)$, $a^-(10)$ et $\alpha(10)$ pour $B = 3T$ en fonction de l'orientation du champ magnétique. L'anisotropie des niveaux peut être calculée à partir de ces courbes avec la relation suivante:

$$A(E(n)) = \left[\frac{E[111] - [100]}{2 \bar{E}} \right] (n)$$

$\bar{E}$ est la valeur moyenne sur 4π de l'énergie du niveau considéré. On obtient alors:

$$A(E a^-(10)) \approx 0.19$$

$$A(E a^+(10)) \approx 0.02$$

$$A(E \alpha(10)) \approx 0.0002$$

Ces différentes anisotropies peuvent être expliquées comme nous l'avons fait pour InSb dans le premier chapitre.

Nous avons aussi calculé les masses des trous lourds et légers dans GaSb ainsi que leur anisotropie au point Γ . La variation de ces masses suivant l'orientation est représentée sur les figures C2 et C3. Tout comme pour l'énergie des niveaux, on peut définir le facteur d'anisotropie $A(m)$

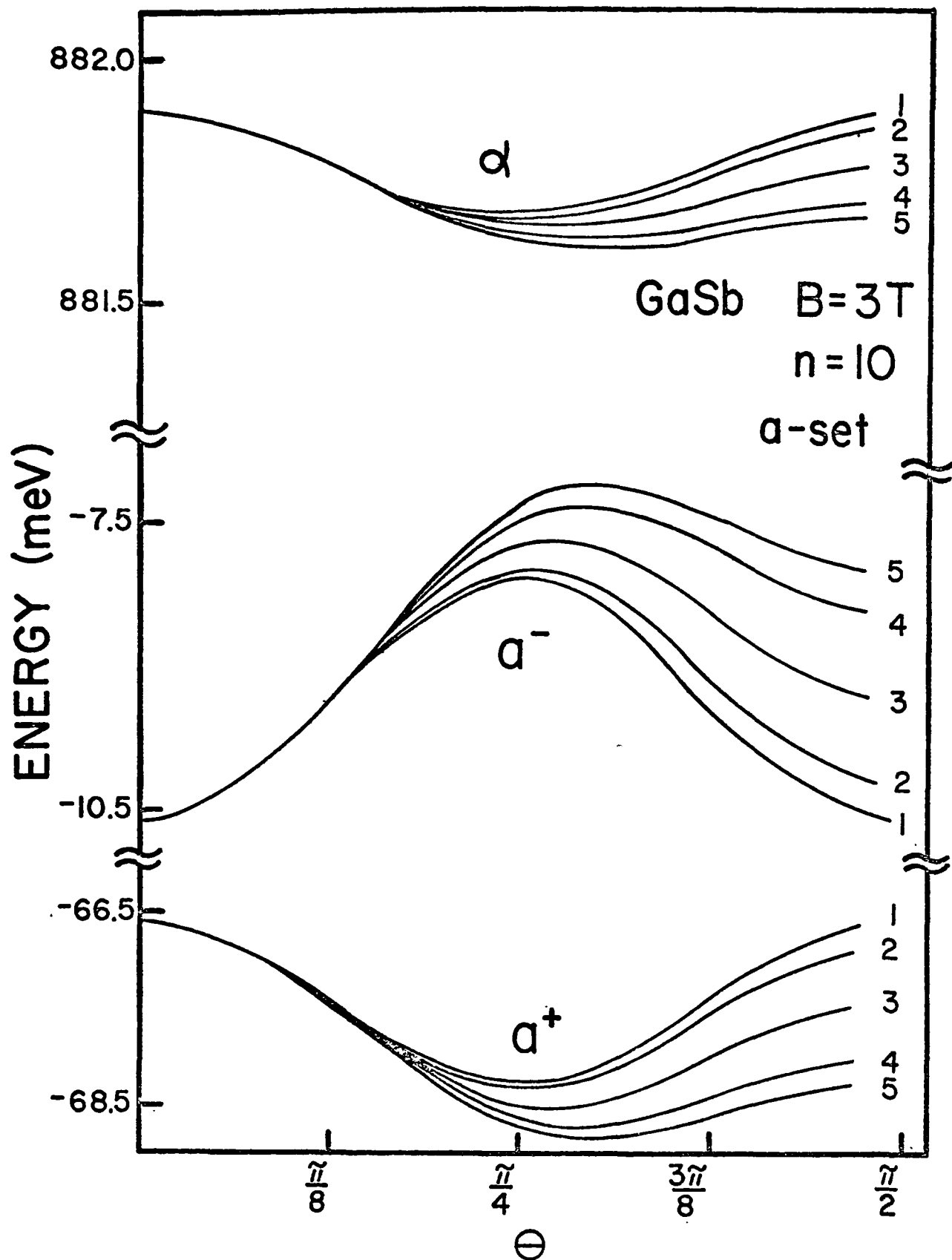


Figure C1

Anisotropie des niveaux $n=10$ de l'ensemble a dans GaSb à 3T.

α , bande de conduction; a^- , trous lourds; a^+ , trous légers.

1 $\rightarrow \phi = 0$, 2 $\rightarrow \phi = \frac{\pi}{16}$, 3 $\rightarrow \phi = \frac{\pi}{8}$, 4 $\rightarrow \phi = \frac{3\pi}{16}$, 5 $\rightarrow \phi = \frac{\pi}{4}$

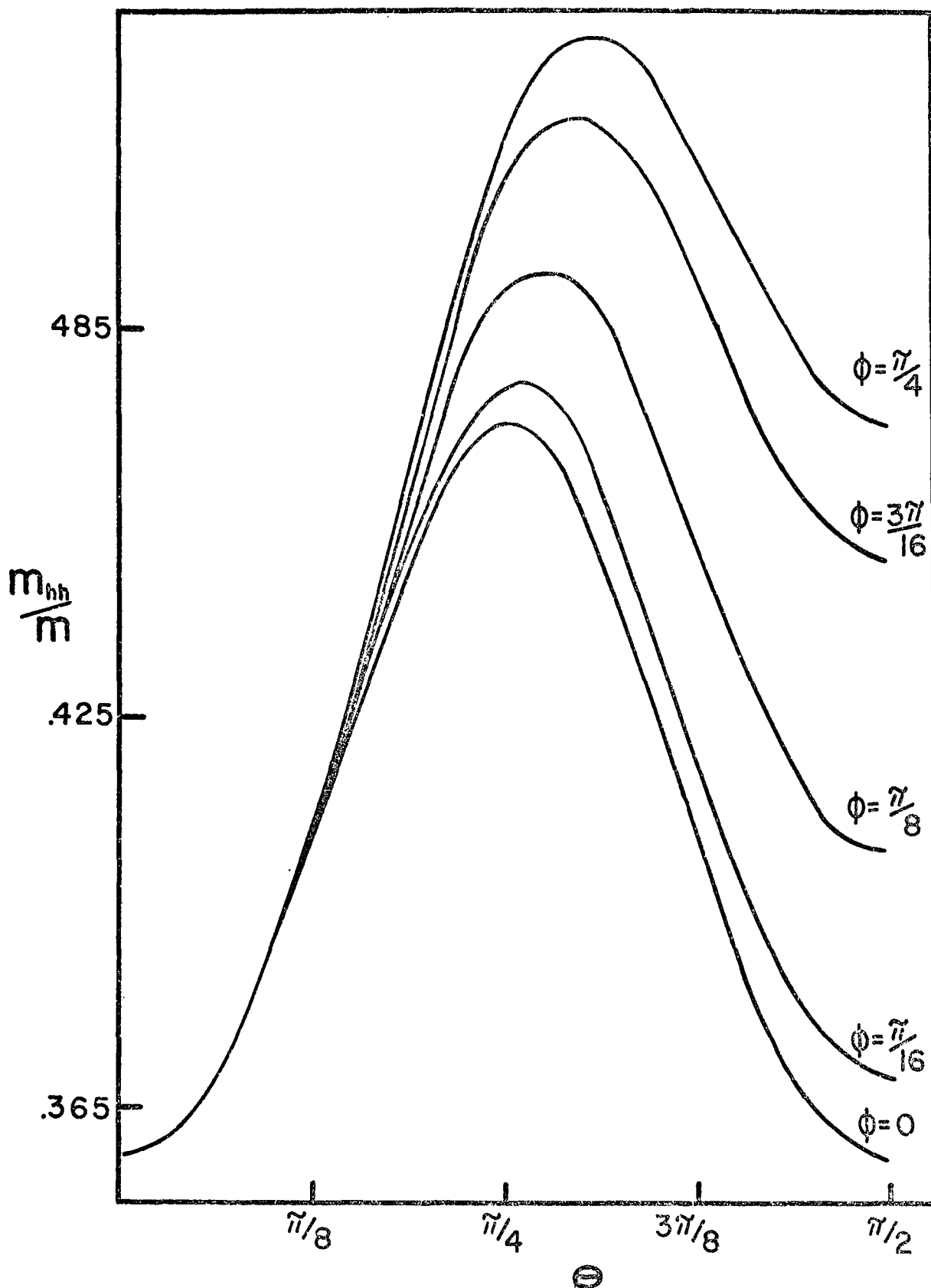


Figure C2

Anisotropie de la masse des trous lourds dans GaSb au point Γ

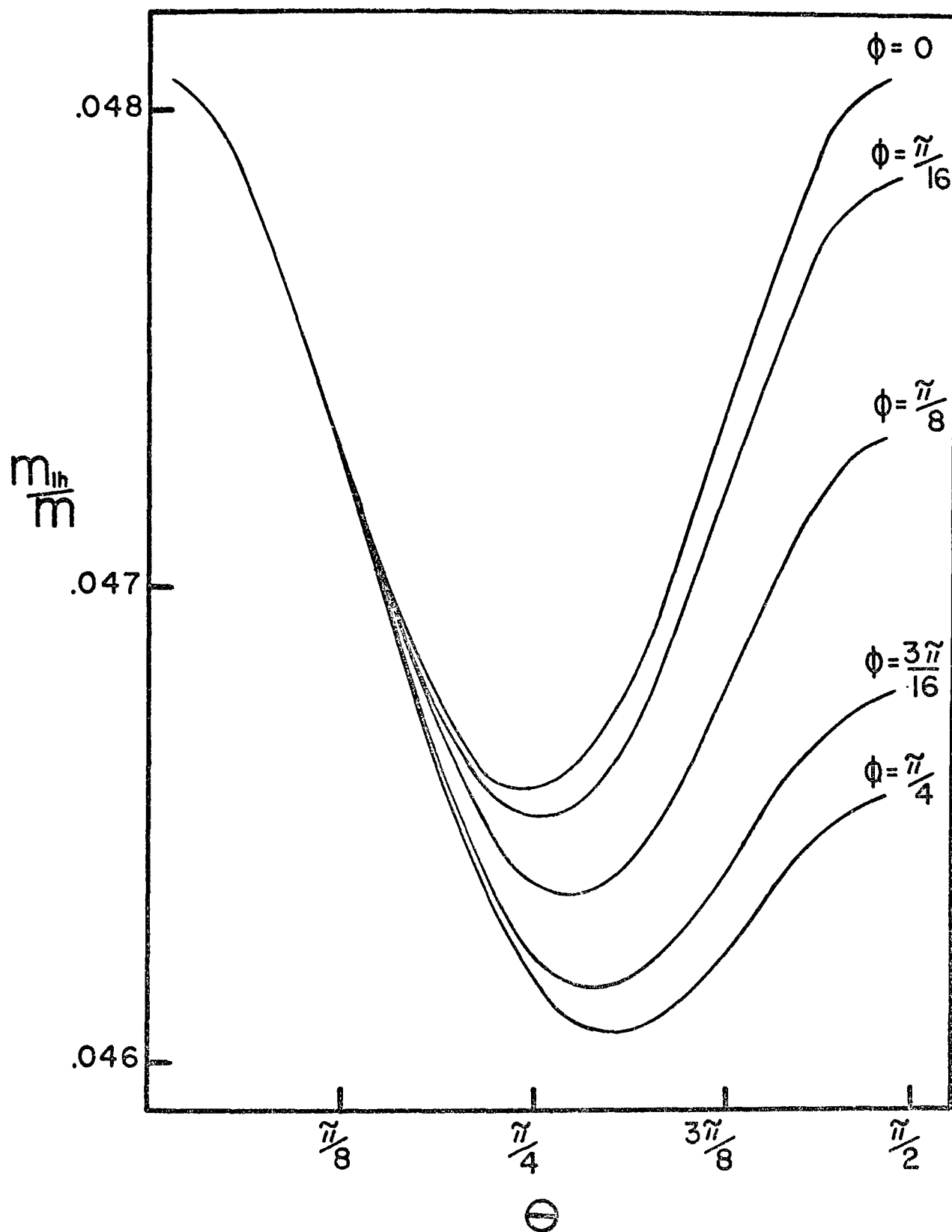


Figure C3

Anisotropie de la masse des trous légers dans GaSb au point Γ

et l'on obtient:

$$A(m_{\ell_h}) \simeq 0.02$$

$$A(m_{hh}) \simeq 0.19$$

Le même genre d'anisotropie peut être obtenu dans n'importe quel semi-conducteur de structure zinc-blende à partir du modèle de bandes couplées.

A N N E X E D

PREPARATION DE $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$

Cette annexe a pour but de donner quelques renseignements de base sur la préparation des échantillons qui nous ont été donnés par J.C. Woolley et A. Joullié. Ces informations sont directement extraites des thèses de W. Coderre [C69] et A. Joullié [J75]. Tout détail complémentaire devra être cherché dans les textes originaux.

I. Quelques remarques sur la formation des alliages

Pour que deux matériaux puissent former une solution solide il est important que leurs mailles cristallines soient à peu près de même dimension afin de minimiser les contraintes dans l'alliage. Les paramètres du réseau cubique de GaSb et InSb satisfont assez bien à cette condition puisque l'on a :

$$\begin{aligned} a(\text{InSb}) &= 6.479 \text{ \AA} \\ a(\text{GaSb}) &= 6.095 \text{ \AA} \end{aligned}$$

Il est préférable en outre que les atomes qui se substituent les uns aux autres dans l'alliage (ici In et Ga) aient des rayons du même ordre de grandeur. Pour In, Ga et Sb ces rayons sont :

$$\begin{aligned} r &= 1.42 \text{ \AA} \quad (\text{In}) \\ r &= 1.26 \text{ \AA} \quad (\text{Ga}) \\ r &= 1.40 \text{ \AA} \quad (\text{Sb}) \end{aligned}$$

Finalement, dans les composés III-V les électrons de valence ont tendance à être polarisés dans la direction du coeur positif des atomes du groupe V et le degré de polarisation varie d'un composé à l'autre. Si l'on forme un alliage à partir de deux composés ayant des polarisations très différentes

il y a des contraintes importantes dans le réseau. D'après Harrisson [HA74] InSb est plus ionique que GaSb les facteurs de polarisation pour ses deux composés sont:

$$\alpha_p = 0.51 \quad (\text{InSb})$$

$$\alpha_p = 0.44 \quad (\text{GaSb})$$

II. Méthodes de préparation de $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$

Les spécimens fournis par le Pr. J.C. Woolley ont été produits par la méthode dite "Step Freeze" ou technique Bridgman horizontale [C69 p 51]. Dans cette méthode on utilise deux fours mis bout à bout. Chaque four a un profil de température constant. Dans l'un la température est supérieure à celle du point de fusion des deux composés, dans l'autre elle est inférieure à celle-ci. Le gradient de température entre les deux fours mis bout à bout doit être le plus raide possible. On enferme dans une capsule de quartz un mélange des deux composés que l'on fait fondre. On obtient un mélange inhomogène. La capsule contenant ce lingot inhomogène est déplacée très lentement d'un four à l'autre ce qui fait que le lingot se solidifie graduellement à partir d'une extrémité. La vitesse de déplacement de la capsule est à peu près de 1.5 cm/jour. Le procédé donne des échantillons homogènes et polycristallins dont la composition varie régulièrement d'une extrémité à l'autre du lingot.

A. Joullié a produit de nombreux échantillons de $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Sb}$ à l'Université de Montpellier et il a étudié en détail les processus de cristallisation et de cinétique de croissance. Plusieurs techniques de croissance ont été utilisées (Bridgman, "Traveling Solvent Method", Epitaxie en phase liquide) qui sont décrites dans sa thèse [J75].

Il a bien voulu nous donner quelques échantillons pour compléter nos mesures au voisinage de GaSb. Ceux-ci ont été produits par la méthode Bridgman et sont polycristallins avec des grains assez gros. Les 2 autres méthodes de croissance donnent des monocristaux dans certaines conditions.

REFERENCES

- 1978 C78 Chen, A.B. and Sher. A. Phys. Rev. Lett, 40, 900,
(1978); Phys. Rev. B, to be published (1978).
- G78 Gratton, M., Thèse, Université d'Ottawa (1978).
- L78 Lindau, J., Chye, P.W., Pianetta, P., Garner, C.M.,
Su, C.Y. and Spicer W.E., Bull. Am. Phys. Soc. 23,
400 (1978).
- LE78 Lee, B.W., Mark, P., Yeh, J.L., Appl. Phys. Lett.
32, 751 (1978).
- W78 Wu, C.J. and Wittry, D.B., J. Appl. Phys. 42, 2827 (1978).
- 1977 C77 Chadi, D.J., Phys. Rev. B16, 790 (1977).
- H77 Hermann, C. and Weisbuch, C., Phys. Rev. B15, 823 (1977).
- R77 Rochon, P., Fortin, E. and Woolley, J.C., Can. J. Phys.
55, 1145 (1977).
- RO77 Rochon, P., Fortin, E., Phys. Rev. B15, 2025 (1977).
- O77 O'Connell, M. Thèse de Maîtrise, Université d'Ottawa (1977).
- 1976 A76 Allegre, J., Averous, N., Jourdan, R. and Joullie, A.,
Journ. Lumin. 11, 339 (1976).
- R76 Rochon, P., Thèse, Université d'Ottawa (1976).
- 1975 B75 Bassani, F. and Pastori Parravicini, G., Electronic
States and Optical Transitions in Solids, (Pergamon 1975).

- C75 Cho, K., Sugu, S., Dreybrodt, W. and Willmann, F.,
Phys. Rev. B11, 1512 (1975).
- D75 Davoine, J. Thèse de Maîtrise, Université d'Ottawa (1975).
- J75 Joullié, A. Thèse, Université de Montpellier (1975).
- M75 Mathieu, H., Auvergne, D., Merle, P. and Rustagi, K.C.,
Phys. Rev. B12, 5846 (1975).
- N75 Nishimo, T., Yamano, F., Hawakawa, Y., Japan. J. Appl.
Phys. 14, 1885 (1975).
- 1974 A74 Auvergne, D., Camassel, J., Mathieu, H. and Joullié, A.,
J. Phys. Chem. Sol. 35, 133 (1974).
- AL74 Altarelli, M. and Lipari, N.O., Phys. Rev. B9, 1733 (1974).
- H74 Hill, R., J. Phys. C7, 516 (1974); *ibid* C7, 521 (1974).
- HA74 Harrisson, W.A. and Ciraci, S., Phys. Rev. B10, 1516 (1974).
- I74 Isomura, S., Prat, F.G.D. and Woolley, J.C. Phys. Sta.
Sol. b65, 213 (1974).
- J74 Joullié, A.M., Alibert, C., Ranvaud, R. and Cardona, M.,
Phys. Sta. Sol. 64, 599 (1974).
- 1973 A73 Altarelli, M. and Lipari, N.O., Phys. Rev. B7, 3798 (1973).
- B73 Berolo, O. Thèse, Université d'Ottawa (1973).
- BE73 Berolo, O., Woolley, J.C. and Van Vechten, J.A., Phys.
Rev. B8, 3794 (1973).
- F73 Fillion, A., Thèse, Université d'Ottawa (1973).
- FI73 Fillion, A. and Fortin, E., Phys. Rev. B8, 3852 (1973).

- H73 Hill, R. and Richardson, D., J. Phys. C6, L115 (1973).
- 1972 A72 Aggarwal, R.L., in Semiconductors and Semimetals, Ed.
by R.K. Willardson and A.C. Beer, Vol. 9 p. 151,
(Academic 1972).
- AL72 Alibert, C., Bordure, G., Langier A. and Chevalier, J.,
Phys. Rev. B6, 1301 (1972).
- J72 Joullié, A., Allegre, J. and Bougnot, G., Mater. Res.
Bull. 7, 1101 (1972).
- M72 Milnes, A.G. and Feucht, D.L., Heterojunctions and
Metal Semiconductor Junctions (Academic 1972).
- R72 Reine, M., Aggarwal, R.L. and Lax, B., Phys. Rev. B5,
3033 (1972).
- V72 Van Vechten, J.A., Berolo, O. and Woolley, J.C., Phys.
Rev. Lett. 29, 1400 (1972).
- 1971 B71 Baldereschi A. and Lipari, N.O., Phys. Rev. B3, 439 (1971).
- G71 Girlanda, R., Il Nuovo Cimento, 6B, 53 (1971).
- H71 Hermann, C. and Lampel, G., Phys. Rev. Lett. 27, 373 (1971).
- L71 Lawaetz, P., Phys. Rev. B4, 3460 (1971).
- 1970 A70 Aggarwal, R.L., Phys. Rev. B2, 446 (1970).
- F70 Bassani, F. and Girlanda, R., Optics Comm. 1, 359 (1970).

- J70 Johnson, E.J. and Dickey, D.H., Phys. Rev. B1, 2676 (1970).
- R70 Reine, M., Thèse, M.I.T. (1970).
- T70 Title, R.S. and Plaskett, T.S., J. Appl. Phys. 41, 334 (1970).
- V70 Van Vechten, J.A. and Bergstresser, T.K., Phys. Rev.,
B1, 3351 (1970).
-
- 1969 A69 Aubin, M.J., Thomas, M.B, Van Tongerloo, E.H. and
Woolley, J.C., Can. J. Phys., 47, 631 (1969).
- C69 Coderre, W.M., Thèse, Université d'Ottawa (1969).
- P69 Pidgeon, C.R. and Groves, S.H. Phys. Rev. 186, 824 (1969).
- PH69 Phillipp, J.C. and Van Vechten, J.A., Phys. Rev. Lett.
22, 705 (1969).
- S69 Sze, S.M., Physics of Semiconductor Devices (Wiley, 1969).
- V69 Van Vechten, J.A., Phys. Rev. 187, 1007 (1969).
-
- 1968 H68 Higginbotham, C.W., Pollak, F.H. and Cardona, M. Proc. IX
Inter. Conf. Semic. Moscow p. 57 (1968).
- S68 Smith, R.A., Semiconductors (Cambridge U.P., 1968).
- V68 Vrehen, Q.H.F., J. Phys. Chem. Sol. 29, 129 (1968).
-
- 1967 J67 Johnson, E.J. in Semiconductors and Semimetals, Ed. by
R.K. Willardson and A.C. Beer, Vol. 3 p. 153 (Academic 1967).
- G67 Groves, S.H., Brown, R.N. and Pidgeon, C.R., Phys. Rev.
161, 779 (1967).

- P67 Pidgeon, C.R., Groves, S.H. and Feinleb, J., Sol. Sta. Comm. 5, 667 (1967).
- PI67 Pidgeon, C.R., Mitchell, D.L. and Brown, R.N., Phys. Rev. 154, 737, (1967).
- W67 Wrobel, J.S. and Levinstein, H., Infrared Phys. 7, 201 (1967).
-
- 1966 B66 Bassani, F., in Proceedings of the International School of Physics Enrico Fermi, Course XXXIV (Academic, 1966).
- BE66 Bell, R.L. and Rogers, K.T., Phys. Rev. 152, 746 (1966).
- P66 Pidgeon, C.R. and Brown, R.N., Phys. Rev. 146, 575 (1966).
- S66 Stradling, R.A., Phys. Lett. 20, 217 (1966).
-
- 1964 B64 Becker, R. Electromagnetic Fields and Interactions⁵, Ed. by F. Sauter (Blaisdell, 1964).
- M64 Mead, C.A. and Spitzer, W.G., Phys. Rev. 134A, 713 (1964).
- MA64 Madelung, O., Physics of III-V Compounds (Wiley 1964).
- W64 Woolley, J.C. and Blazey, K.W., J. Phys. Chem. Sol. 25, 713 (1964).
-
- 1963 C63 Cardona, M., J. Phys. Chem. Sol. 24, 1543 (1963).
- K63 Koster, G.K., Dimmock, J.O., Wheeler, R.G. and Satz, H., Properties of the Thirty-Two Point Groups (MIT, Cambridge 1963).

- W63 Wood, E.A., Crystal Orientation Manual (Columbia U.P. 1963).
- 1962 W62 Woolley, J.C. in Compounds Semiconductors,
Chap. 1, Ed. by Willardson and Goering, (Reinhold, 1962)
- 1961 W61 Woolley, J.C. and Evans, J.A., Proc. Phys. Soc. 78,
354 (1961).
- Z61 Zwerdling, S., Kleiner, W.H. and Theriault, J.P., J. Appl.
Phys. Supp. 32, 2118 (1961).
- 1960 B60 Bernski, G., Phys. Rev. Lett. 4, 62 (1960).
- E60 Elliott, R.J. and Loudon, R., J. Phys. Chem. Sol.
15, 196 (1960).
- 1959 B59 Burstein, E., Picus, G.S., Wallis, R.F. and Blatt, F.
Phys. Rev. 113, 15 (1959).
- R59 Roth, L.M., Lax, B. and Zwerdling, S., Phys. Rev. 114,
90 (1959).
- W59 Wigner, E.P., Group Theory and its Application to Atomic
Spectra, (Academic 1959).
- 1957 E57 Ehrenreich, H., J. Phys. Chem. Sol., 2, 131 (1957).
- K57 Kane, E.O., J. Phys. Chem. Sol., 1, 249 (1957).

- 1956 D56 Dexter, R.N., Zeiger, H.J. and Lax, B., Phys. Rev. 104,
637 (1956).
- L56 Luttinger, J.M., Phys. Rev. 102, 1030 (1956).
- 1955 D55 Dresselhaus, G., Phys. Rev., 100, 580 (1955).
- DR55 Dresselhaus, G., Kip, A.F. and Kittel, C., Phys. Rev.
98, 368 (1955).
- L55 Luttinger, J.M. and Kohn, W., Phys. Rev. 97, 869 (1955).
- P55 Paramenter, R.H., Phys. Rev. 97, 587 (1955).
- 1954 G54 Gartner, W.N., Phys. Rev. 116, 84 (1954).
- 1951 L51 Löwdin, P., J. Chem. Phys. 19, 1346 (1951).
- 1947 V47 Von der Lage, F. and Bethe, H.A., Phys. Rev. 71, 612 (1947).
- 1944 H44 Heitler, W., The Quantum Theory of Radiation (Oxford U.P.
1944).
- 1936 B36 Bouckaert, L.P., Smoluchowski, R. and Wigner, E.P.
Phys. Rev. 50, 58 (1936).
- 1930 L30 Landau, L.D., Z. Phys. 64, 629 (1930).

N O T I C E B I O G R A P H I Q U E

Alain P. Roth est né le 20 mai 1948 à Nancy (France). Après des études secondaires il est entré en 1966 à l'Université de Nancy où il a obtenu successivement un D.U.E.S. (Mathématiques et Physique), une Licence (Physique) et une Maîtrise (Physique). En 1971 il est allé à l'Université de Rennes (Laboratoire de Spectroscopie) pour y préparer un Doctorat de 3^{ème} Cycle (Physique) obtenu en 1974. Lauréat d'une bourse d'Echanges Culturels du Conseil des Arts du Canada il est venu à l'Université d'Ottawa pour y préparer un Doctorat en Physique (Ph.D).

Durant ces années de Recherche il a été l'auteur ou le co-auteur des publications suivantes:

G. Stephan, M. Nisar et A. Roth, C.R. Acad. Sc. Paris, 274, 807 (1972)

M. Nisar, A. Roth, G. Stephan and Mme. S. Robin, Opt. Comm. 8, 254 (1973)

A. Roth and Mme S. Robin, Solid St. Comm. 14, 673 (1974)

A. Roth and E. Fortin, Phys. Rev. B. (1978) in Press

A. Roth and E. Fortin, Can. J. Phys. (1978) to be published

Des communications concernant ce travail ont été présentées aux conférences suivantes:

APS, Washington, Mars 1978

ACFAS, Ottawa, Mai 1978

ACP, London, Ont. Juin 1978

14th Int^{al} Conf., on the Physics of Semic. Edinburgh, Scotland,
Sept. 1978